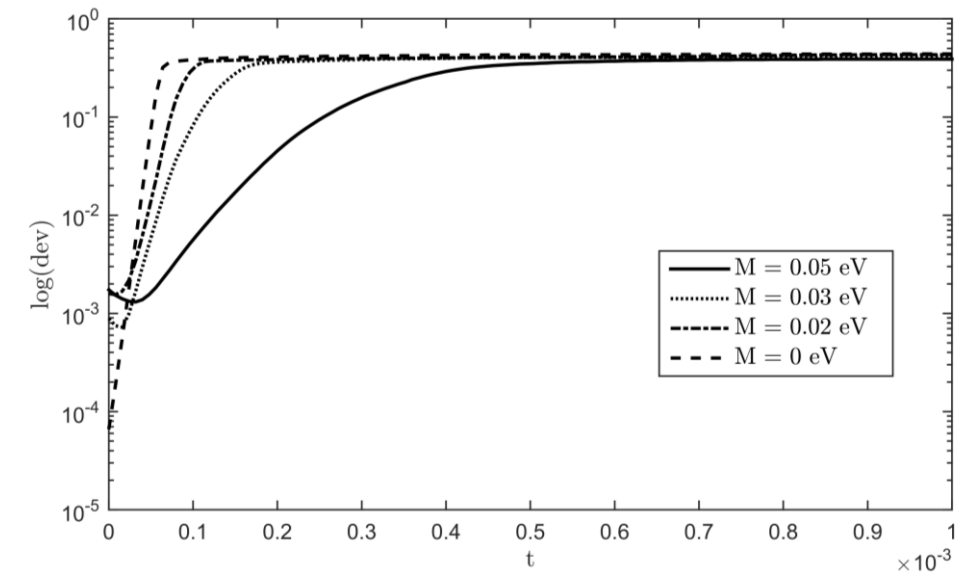


**Рис. 3.** Логарифмічна залежність девіації  $dev$  і характерної довжини  $\lambda$  неоднорідності системи від часу, для різних співвідношень частот:  $\nu_B = 1e + 13$  Гц; 1)  $\nu_A = 1e + 13$  Гц, 2)  $\nu_A = 0.2e + 13$  Гц, 3)  $\nu_A = 0.1e + 13$  Гц, 4)  $\nu_A = 0.05e + 13$  Гц, 5)  $\nu_A = 0.025e + 13$  Гц.

З рис. 3 видно, що при зменшенні рухливості компоненту А, час до розпаду збільшується, при цьому нахил кривої наростання девіації, коли відбувається сам розпад, зменшується.



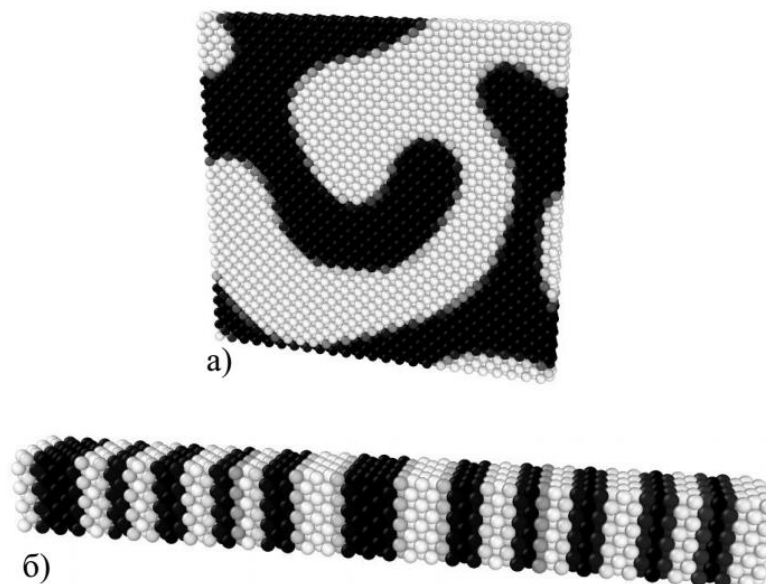
**Рис. 4.** Логарифмічна залежність девіації від часу, для різних значень коефіцієнту асиметрії.

Моделювання спінодального розпаду було проведено для випадку однакових частот  $\nu_A = \nu_B = 1e + 13$  Гц, але різних коефіцієнтів асиметрії (рис. 4).

У цьому випадку швидкість експоненційного наростання девіації зменшувалась при збільшенні значення асиметрії, кут нахилу  $\lambda$  став близьким до значення 1.

Для перевірки коректності результатів комп'ютерні експерименти були повторені при іншому рівню початкового шуму ( $\delta \sim 10^{-8}$ ), результати при цьому практично не змінилися. Також були повторені експерименти для симетричного початкового шуму, коли початкове відхилення концентрації задається в центральній частині зразка лише в одному вузлі. Очевидно при цьому стартова конфігурація стає набагато симетричнішою (див. рис. 2), але поведінка в часі двох основних параметрів  $\lambda$ , і  $dev$  залишається аналогічною.

Комп'ютерні експерименти процесу спінодального розпаду були також проведені для зразків різної форми (рис. 5)



**Рис. 5.** Спінодальний розпад, початковий шум в кожному вузлі:

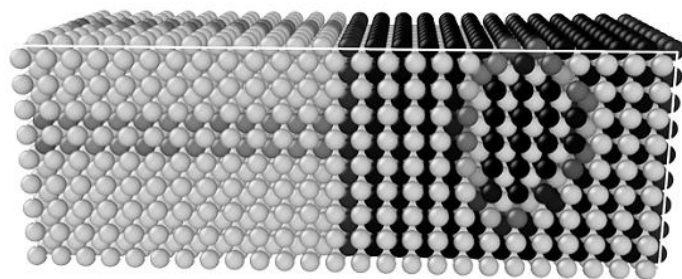
а) тонка пластина, б) тонкий стержень

Модифікований метод КМФ з врахуванням другої координаційної сфери був застосований до комп'ютерного моделювання процесу упорядкування в процесі дифузії для двокомпонентної системи з об'ємноцетрованою кубічною ґраткою (ОЦК). Енергія змішування для всіх модельних експериментів впорядкування була рівною  $V = -0.03 eV$  для першої координаційної сфери і

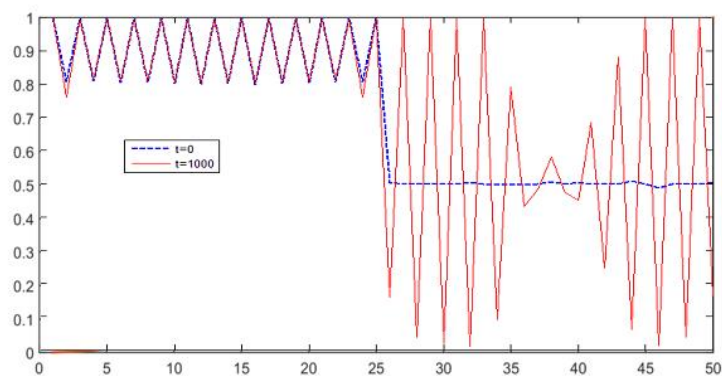
$\varepsilon = 0.03 \text{ eV}$  для другої сфери. Коефіцієнт асиметрії дещо модифікуємо до вигляду  $m' = \frac{2ZM \lg e}{kT}$ . Температура в процесі моделювання  $T = 700 \text{ K}$ .

Для моделювання в першому випадку (рис. 6) був взятий зразок половина якого мала середню концентрацію  $C_A = 0.9$  ( $C_B = 1 - C_A$ ), а інша половина концентрацію  $C_A = 0.5$ . При цьому в зразку був доданий невеликий початковий шум концентрацій навколо середнього значення вздовж осей OX-OY вигляду  $C_A = \bar{C} + \delta(2 \cdot \text{rand} - 1)$ . Коефіцієнт асиметрії був рівний 0. Як результат в кінці процесі упорядкування можна побачити утворення антифазного домену.

У другому випадку (рис. 7) концентрації були  $C_A = 0.9$  для першої половини зразка і  $C_A = 0.1$  для другої. У цьому випадку зразки були промодельовані з різними коефіцієнтами асиметрії  $m' = 0$  і  $m' = -4$ . Зміна коефіцієнту асиметрії вплинула хід впорядкування в процесі дифузії компоненту А і компоненту В.



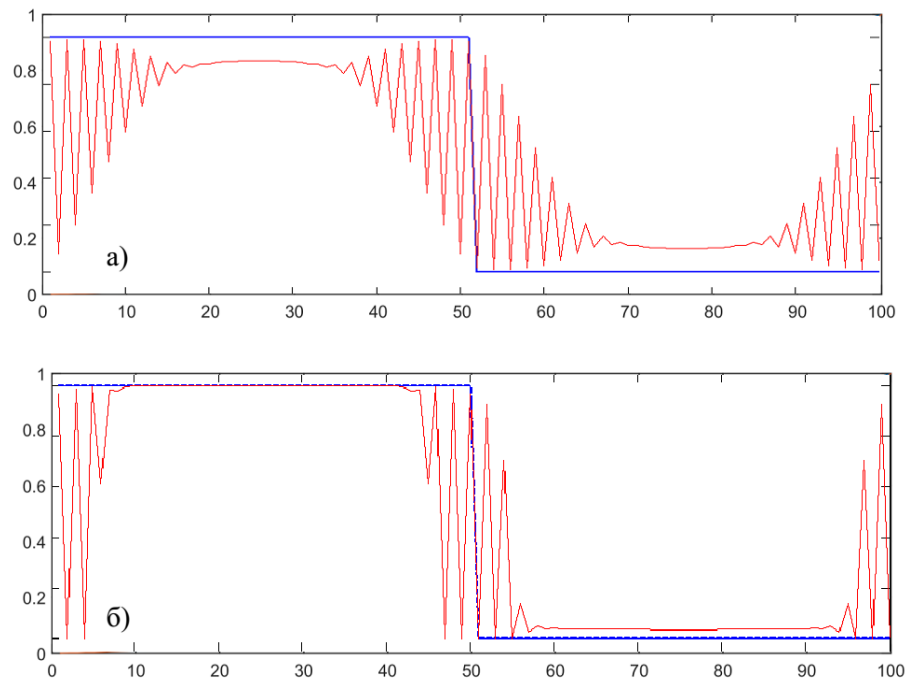
а)



б)

**Рис. 6.** Впорядкування із початковим шумом вздовж осей OX-OY:

а) тривимірний зразок, б) концентраційний профіль зразка вздовж вісі OX



**Рис. 7.** Концентраційні профілі зразка по вісі ОХ для випадку впорядкування з різною асиметрією : а)  $m'=0$ , б)  $m'=-4$

**Висновки.** Кінетичний середньопольовий метод узагальнений на вакансійний механізм із використанням наближення квазістаціонарності вакансій і застосований до моделювання кінетики спінодального розпаду. Також даний метод розширений для врахування другої координаційної сфери і застосований до моделювання процесу впорядкування в бінарній системі.

Як і слід було очікувати, процес спінодального розпаду природнім чином поділяється на наступні стадії – (1) утворення «кістяка» структури (вихід на константу характерного розміру неоднорідності), (2) експоненційне наростання девіації, (3) коалесценція.

Параметри спінодального розпаду практично не залежать від початкового шуму. Коефіцієнт асиметрії помітно впливає на процес впорядкування в процесі дифузії двох компонент.

Основні результати комп'ютерних експериментів співпадають із результатами феноменологічної теорії [9] з урахування нерівноважного розподілу вакансій.

**Подяки.** Автор вдячний проф. А. М. Гусаку., PhD habil. Z. Erdélyi та доц. М. О. Пасічному за постановку задачі, консультації під час її розв’язання та обговорення результатів. Робота була підтримана європейською програмою FP7-PEOPLE-2013-IRSES (грантова угода: PIRSES-GA-2013-612552), а також, частково, грантом МОН України.

### **References (in language original)**

1. Martin G. Atomic mobility in Cahn’s diffusion model / G. Martin // *Phys. Rev. B* – 1990. – №41.– P. 2279-2283.
2. Erdélyi Z. Nonparabolic nanoscale shift of phase boundaries in binary systems with restricted solubility / Z. Erdélyi, G. L. Katona, and D. L. Beke // *Phys. Rev. B.*– 2004 . – №69(11).
3. Erdélyi Z. Transient Interface Sharpening in Miscible Alloys / Z. Erdélyi et al.// *Science.*– 2004.– №306. – P. 1913-1915.
4. Erdélyi Z. Interface Sharpening instead of Broadening by Diffusion in Ideal Binary Alloys / Z. Erdélyi, I. Szabó, D. Beke // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – №89.
5. Erdélyi Z. Dissolution and off-stoichiometric formation of compound layers in solid state reactions. / Z. Erdélyi, D. Beke, A. Taranovsky // *Appl. Phys. Lett.* – 2008 .– №92(13).
6. Storozhuk N. Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion / N. Storozhuk, K. Sopiga, A. Gusak // *Philosophical Magazine* .– 2013. – №93. – P. 1999-2012.
7. Khachaturyan A. *Theory of Structural Transformations in Solids.* / A. Khachaturyan. – Dover Publications, 2008. – 592 p.
8. Erdélyi Z. Kinetic of surface segregation and spinodal decomposition in thin-films - generalization of Martin's model for vacancy mechanism / Z. Erdélyi, H. Bakker, and D. L. Beke // *Acta Univ. Deb.* – 2002. – №34-35. – P. 321-337.
9. Tyutyunnyk N. V. Role of non-equilibrium vacancies in spinodal decomposition. / N. V. Tyutyunnyk, A. M. Gusak // *Ukr. J. Phys.* – 2012. – №57. – P. 628-635.

10. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool / A. Stukowski // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2010. – №18(01)

### References

1. Martin G. (1990). Atomic mobility in Cahn's diffusion model. *Phys. Rev., B* 41, 2279-2283.
2. Erdélyi Z., Katona G. L., Beke D. L. (2004). Nonparabolic nanoscale shift of phase boundaries in binary systems with restricted solubility. *Phys. Rev. B.*, 69(11).
3. Erdélyi Z et al. (2004). Transient Interface Sharpening in Miscible Alloys. *Science*, 306, 1913-1915.
4. Erdélyi Z., Szabó I., D. Beke (2002). Interface Sharpening instead of Broadening by Diffusion in Ideal Binary Alloys. *Phys. Rev. Lett.*, 89.
5. Erdélyi Z., D. Beke, Taranovskyy A. (2008) Dissolution and off-stoichiometric formation of compound layers in solid state reactions. *Appl. Phys. Lett.* , 92(13).
6. Storozhuk N., Sopiga K., Gusak A. (2013). Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion. *Philosophical Magazine*, 93, 1999-2012.
7. Khachaturyan A. (2008). *Theory of Structural Transformations in Solids*. Dover Publications.
8. Erdélyi Z., Bakker H. and Beke D. L. (2002). Kinetic of surface segregation and spinodal decomposition in thin-films - generalization of Martin's model for vacanz mechanism. *Acta Univ. Deb.*, 34-35, 321-337.
9. Tyutyunnyk N. V., Gusak A. M. (2012). Role of non-equilibrium vacancies in spinodal decomposition. *Ukr. J. Phys.*, 57, 628-635.
10. Stukowski A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 18(01)

**BEZPALCHUK Volodymyr Mykolaiovych**

PhD student,

Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy,

[bezpalchukv@gmail.com](mailto:bezpalchukv@gmail.com)

## **KINETIC MEAN FIELD SIMULATION OF SPINODAL DECOMPOSITION AND ORDERING**

### **Abstract**

**Introduction.** The paper presents a general description and application of the Marten-Erdelyi-Beke kinetic mean field method (KMF) for atomistic computer simulation. KMF model [1-5] had been used by Beke et al. to study the diffusion of asymmetric systems [4] during the last 10 years. Asymmetry of diffusion means, as a rule, that one of the components of diffusion couple is much more fusible and therefore all diffusion coefficients strongly depend on the concentration, varying by several orders within the allowable concentration range. Asymmetry coefficient was used in this paper for simulation of 3D spinodal decomposition.

**Purpose.** The research aims at the improvement of the KMF method and simulation with it the process of the ordering and spinodal decomposition in 3D sample.

**Results.** The original 3D method was generalized for vacancy diffusion mechanism with quasi-stationary approximation of vacancies at three-dimensional case. The non-vacancy algorithm was expanded for the second coordination sphere. All modification of this method was made based on three-dimensional KMF model [6]. This model determines that concentration prescribes to a particular site (atom). Rate of change of concentration in each site of sample is defined according to matter conservation and corresponding local flux density balance at each site.

$$\frac{dC_i}{dt} = -\sum_{k=1}^Z C_i(1-C_k)\Gamma_{ik} + \sum_{k=1}^Z C_k(1-C_i)\Gamma_{ki},$$

where  $C_i$  is the concentration of A component at this site,  $C_k$  – is the concentration in the k-th neighbouring site with Z (total number of nearest neighbours).  $C_i(1-C_k)$  is the probability that the i-th site is occupied by A component atom, and the neighbouring k-th site is occupied by B component atom,  $\Gamma_{ik}$  is the probability of an exchange of atoms per unit time.

**Conclusion.** The simulation, by generalized KMF method for three-dimensional sample case, was made. Using the original and the expanded methods the computer simulation of spinodal decomposition for binary system, was made, using different asymmetry coefficients and values of components mobility. The dependences of the spinodal decomposition parameters (the characteristic inhomogeneity and deviation of concentration) on the mobilities of components and on the asymmetry coefficient are presented. The exponential growth rate of the deviation is determined by the slow component and is practically independent on the

initial noise in the system. Expanded model of KMF for simulation of ordering in binary diffusion couples with body-centered cubic coherent lattice, are suggested.

**Keywords:** spinodal decomposition, ordering, mean-field method, vacancies, atomistic modeling.