

В.М. Безпальчук, О.О. Богатирьов, А.М. Гусак

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЇ МІЧЕНИХ АТОМІВ В УПОРЯДКОВАНОМУ СПЛАВІ З $L1_2$ СТРУКТУРОЮ

У роботі представлено опис нової моделі дифузії мічених атомів (без використання співвідношення Ейнштейна) і кінетики впорядкування в бінарній системі Ni_3Al з ГЦК ґраткою і структурою $L1_2$, на базі Кінетичного Середньопольового методу (Kinetic Mean Field – KMF). На основі даного нового методу визначено коефіцієнти дифузії, а також енергії активації для кожного з компонентів з використанням обмінного та вакансійного механізму дифузії.

Система була змодельована з фіксованими значеннями парних енергій взаємодій і енергією сидлової точки, наближених до рівноважних властивостей. Моделювання дифузії мічених атомів Ni і Al в системі Ni_3Al дало вищу дифузійну швидкість атомів Ni , що пов'язано з легшою підреїтковою дифузійною швидкістю атомів Ni в структурі $L1_2$ системи Ni_3Al . Також отримано вищу енергію активації для мічених атомів Al і її близьке значення до енергії активації кінетики впорядкування. Модельні експерименти кінетики впорядкування показали, що на відміну від обмінного механізму при вакансійному механізмі кінетика впорядкування в $L1_2$ описується двома часами релаксації.

Ключові слова: дифузія мічених атомів, впорядкування, середньопольовий метод, вакансії, моделювання

Вступ

Для моделювання впорядкування та атомної міграції у впорядкованих сплавах часто використовують кінетичний метод Монте-Карло [1-3]. Моделювання цим методом, однак, потребує багато обчислювального часу. Тому в даній роботі взято за основу альтернативний підхід, а саме кінетичний середньопольовий метод (Kinetic Mean Field – KMF). Дана модель була вперше запропонована Ж. Мартеном в 1990 [4] як квазіодновимірний алгоритм. Далі він був розвинутий та застосований в дослідженні наноплівки з дифузійною асиметрією в серії робіт групи З. Ерделі та Д. Беке [5-8], потім розширений до 3D в [9], і недавно узагальнений, доданням динамічного шуму, до методу Stochastic Kinetic Mean Field (SKMF) в роботі [10].

Основне кінетичне рівняння з роботи Мартена (записане для послідовності атомних площин – квазіодновимірна модель) є рівнянням балансу з самоузгодженими частотами стрибків:

$$\frac{dC_i}{dt} = -Z_v \left[C_i(1-C_{i-1})\Gamma_{i,i-1} - (1-C_i)C_{i-1}\Gamma_{i-1,i} + C_i(1-C_{i+1})\Gamma_{i,i+1} - (1-C_i)C_{i+1}\Gamma_{i+1,i} \right]. \quad (1)$$

C_i - це ймовірність того, що у вузлі площини “i” знаходиться атом сорту А, $Z = Z_l + 2Z_v$ – загальна кількість найближчих сусідів, Z_l – визначає кількість найближчих сусідів в центральній “i”-ій площині, перпендикулярній до концентраційного градієнту, Z_v – кількість найближчих сусідів в “i+1” (або “i-1”) площині.

$$\Gamma_{i,i+1} = \nu \exp\left(-\frac{E_{i,i+1}}{kT}\right). \quad (2)$$

$\Gamma_{i,i+1}$ – це частота (ймовірність за одиницю часу) обміну атома сорту А в площині “і” та атому сорту В в площині “і+1”. $E_{i,i+1}$ – різниця між енергією сідлової точки E^{saddle} і $\bar{E}_{i,i+1}$ – енергією взаємодії двох атомів з їх сусідами до обміну:

$$E_{i,i+1} = E^{saddle} - \bar{E}_{i,i+1} \quad (3)$$

Енергія сідлової точки E^{saddle} в моделюванні береться за константу ($E^{saddle} = 0$) для всіх обмінів, енергії $\bar{E}_{i,i+1}$ визначаються в наближенні середнього поля із використанням концентрацій у сусідніх вузлах і значень парних енергій взаємодії $V_{\mu\nu}$. У випадку бінарної системи, енергія взаємодії пари А-В з сусідами до обміну визначається як:

$$\begin{aligned} \bar{E}_{i,i+1} = & Z_v C_{i+1} V_{AA} + Z_v (1 - C_{i+1}) V_{AB} + Z_v C_{i-1} V_{AA} + Z_v (1 - C_{i-1}) V_{AB} + \\ & Z_v C_i V_{AA} + Z_l (1 - C_i) V_{AB} + Z_v C_{i+2} V_{AB} + Z_v (1 - C_{i+2}) V_{BB} + \\ & Z_v C_i V_{AB} + Z_v (1 - C_i) V_{BB} + Z_l C_{i+1} V_{AB} + Z_l (1 - C_{i+1}) V_{BB} \end{aligned} \quad (4)$$

Група Беке і Ерделі застосовувала дану квазіодновимірну модель для моделювання початкових стадій взаємної дифузії у бінарних дифузійних парах з великою різницею значень енергій V_{AA} та V_{BB} . В результаті, ними був передбачений теоретично і перевірений експериментально ефект загострення концентраційного профілю (замість згладжування) на початковій стадії дифузії [5,6], який в подальшому був перевірений і підтверджений експериментально. Крім того, для дифузійної пари з решіткою ОЦК і значною асиметрією парних взаємодій був знайдений ефект впорядкування фази В2 з концентраціями, значно меншими за стехіометричну [8].

В роботі [9] було запропоновано розширення схеми методу КМФ для тривимірного випадку:

$$\frac{dC_i}{dt} = -C_i \sum_{j=1}^Z (1 - C_j) \Gamma_{i,j} + (1 - C_i) \sum_{j=1}^Z C_j \Gamma_{j,i} \quad (5)$$

$$\Gamma_{i,j} = \nu \exp\left(\frac{-(E^{saddle} - \bar{E}_{i,j})}{kT}\right) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \bar{E}_{i,j} &= E_i^A + E_j^B \\ E_i^A &= V_{AA} \sum_{in}^Z C_{in} + V_{AB} \sum_{in}^Z (1 - C_{in}) , \\ E_j^B &= V_{AB} \sum_{jn}^Z C_{jn} + V_{BB} \sum_{jn}^Z (1 - C_{jn}) \end{aligned} \quad (7)$$

де $\sum_{in=1}^Z$ визначає суму по найближчих сусідах вузла “і”, $\sum_{jn=1}^Z$ – сума по найближчих сусідах вузла ”j”, що в свою чергу є найближчим сусідом вузла “і” (див. Рис. 1).

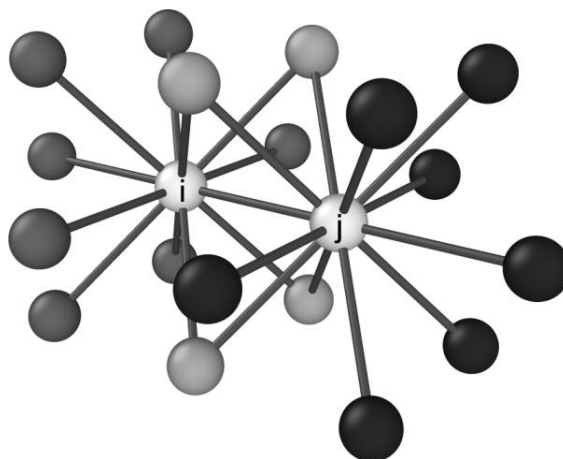


Рис.1. Схема розміщення сусідів при обчисленні енергії перед обміном атомів у вузлах “i” та “j”. Сірі і світло-сірі вузли є сусідами вузла “i” (індекс “in”), чорні та світло-сірі вузли є сусідами вузла “j” (індекс “jn”). Світло-сірі є спільними сусідами для обох вузлів “i” та “j”.

Для зручності і зменшення кількості початкових параметрів, перепишемо рівняння (7-8) у термінах безрозмірного часу:

$$\begin{aligned} \bar{E}_{i(A)j(B)} &= V_{AB} \cdot 2Z + M - V \sum_{in=1}^Z C_A in - M + V \sum_{jn=1}^Z C_B jn = \\ &= V_{AB} + V_{BB} \cdot Z + M - V \sum_{in=1}^Z C_A in + M + V \sum_{jn=1}^Z C_A jn \end{aligned} \quad (8)$$

$$\Gamma_{i,j} = \Gamma_0 \tilde{\Gamma}_{i,j}, \quad (9)$$

енергія змішування і дифузійна асиметрія визначатимуться відповідно:

$$V = V_{AB} - \frac{V_{AA} + V_{BB}}{2}, \quad M = \frac{V_{AA} - V_{BB}}{2}, \quad (10)$$

де безрозмірна частота $\tilde{\Gamma}_{i,j}$ та безрозмірний передекспоненційний множник Γ_0 дорівнюють:

$$\tilde{\Gamma}_{i,j} = \exp \left(\frac{\left(M - V \sum_{in=1}^Z C_A in \right) - \left(M + V \sum_{jn=1}^Z C_A jn \right)}{kT} \right), \quad (11)$$

$$\Gamma_0 = \nu \cdot \exp \left(- \frac{E^{saddle} - (V_{AB} + V_{BB})Z}{kT} \right), \quad (12)$$

Безрозмірний час може бути визначений як

$$\tilde{t} \equiv \Gamma_0 t, \quad (13)$$

Будучи суто детерміністичним, стандартний KMF-метод не був в змозі моделювати перетворення з метастабільної фази, для яких необхідна наявність флуктуацій. Для можливості моделювання фазових перетворень першого роду в ГЦК структурах в метод було додано спочатку початковий шум (початковий шум ймовірності у вузлах ґратниці) [9], а потім у [10] введено динамічний шум частот для забезпечення подолання нуклеаційного бар'єру. Нова версія KMF методу була названа SKMF – Stochastic Kinetic Mean-Field (Стохастичний Кінетичний Середньопольовий метод).

Рівняння балансу в SKMF може бути записаний в наступній формі

$$\frac{dC_i}{dt} = - \sum_{j=1}^Z \left[C_i(1-C_j) \Gamma_{i,j} + \delta\Gamma_{i,j}^{Lang} - (1-C_i)C_j \Gamma_{j,i} + \delta\Gamma_{j,i}^{Lang} \right], \quad (14)$$

де Ланжевенівський шум частот виражається як

$$\delta\Gamma_{i,j}^{Lang} = \frac{A_n}{\sqrt{dt}} \sqrt{3}(2 \cdot random - 1). \quad (15)$$

В [10] було показано, що зміна амплітуди шуму, може бути аналогом кількості запусків Кінетичного Монте-Карло.

1. Модифікація SKMF методу для застосування до дифузії мічених атомів

1.1 Обмінний механізм дифузії

Метод KMF може бути досить просто модифікований для застосування в дифузії мічених атомів. Звичайно, в цьому методі ми не можемо відслідковувати траєкторії окремих атомів (як, наприклад, у методі КМС). Тому тут не можна буде використати співвідношення Ейнштейна для середнього квадрату відхилення мічених атомів як лінійної функції часу. Натомість, можна використати загальновідомий аналітичний розв'язок для точкового джерела. Для цього замінимо частину початкових атомів сорту А на мічені атоми А*, а решту атомів, що залишились, позначимо як А⁰. Виконаємо цю заміну в тонкому шарі з товщиною “h” по центру зразка (скажімо, якщо замінити всі базові атоми А на мічені атоми того ж сорту у двох сусідніх площинах (100), тоді $h = 2d_{100}$). В результаті ми зможемо відслідкувати зміну локально усередненого значення (по двох площинах) концентрації мічених атомів. Локальне усереднення необхідне, так як, у впорядкованій ґратниці можна очікувати постійні осциляції між двома площинами. Після заміни мають виконуватись співвідношення: $C_A^* + C_A^0 = C_A$, $C_B = 1 - C_A^0 - C_A^*$, де $C_{A(B)}$ – загальна концентрація атомів сорту А(В), $C_{A(B)}^0$ – концентрація атомів сорту А(В), $C_{A(B)}^*$ – концентрація мічених атомів сорту А(В). Можна очікувати, що залежність усередненого профілю концентрації від часу матиме вигляд Гаусіана:

$$C_A^* \ll X \gg \frac{C_{A0}^* h}{\sqrt{4\pi D_A^* t}} \exp\left(-\frac{X^2}{4D_A^* t}\right), \ln C_A^* \ll X \gg \text{const} - \frac{1}{4D_A^* t} X^2 \quad (16)$$

Нахил очікуваної лінійної залежності логарифму концентрації від квадрату відстані дасть коефіцієнт дифузії (при відомому часі).

При введенні мічених атомів, кінетичні рівняння будуть дещо модифіковані:

$$\begin{aligned} \frac{dC_A^*}{dt} = & -C_A^* \sum_{k=1}^Z C_A^0(k) \Gamma_{ik}^{A^*A^0} - C_A^* \sum_{k=1}^Z C_B(k) \Gamma_{ik}^{A^*B} + \\ & + C_A^0 \sum_{k=1}^Z C_A^*(k) \Gamma_{ki}^{A^0A^*} + C_B \sum_{k=1}^Z C_A^*(k) \Gamma_{ki}^{BA^*} \end{aligned} \quad (17)$$

$$\frac{dC_A^0(i)}{dt} = -C_A^0(i) \sum_{k=1}^Z C_A^*(k) \Gamma_{ik}^{A^0A^*} - C_A^0(i) \sum_{k=1}^Z C_B(k) \Gamma_{ik}^{A^0B} +$$

$$+ C_A^*(i) \sum_{k=1}^Z C_A^0(k) \Gamma_{ki}^{A^*A^0} + C_B(i) \sum_{k=1}^Z C_A^0(k) \Gamma_{ki}^{BA^0} \quad (18)$$

$$\Gamma_{ik}^{A^*A^0} = \nu \exp\left(-\frac{E^{saddle} - E_{A^*A^0}^{before}}{kT}\right), \quad (19)$$

$$E_{A^*A^0}^{before} = V_{AA} \sum_{i'=1}^Z C_A^0(i') + C_A^*(i') + V_{AB} \sum_{i'=1}^Z C_B(i') + V_{AA} \sum_{k'=1}^Z C_A^0(k') + C_A^*(k') + V_{AB} \sum_{k'=1}^Z C_B(k') \quad (20)$$

$$\Gamma_{ik}^{A^*B} = \nu \exp\left(-\frac{E^{saddle} - E_{A^*B}^{before}}{kT}\right), \quad (21)$$

$$E_{A^*B}^{before} = V_{AA} \sum_{i'=1}^Z C_A^0(i') + C_A^*(i') + V_{AB} \sum_{i'=1}^Z C_B(i') + V_{AB} \sum_{k'=1}^Z C_A^0(k') + C_A^*(k') + V_{BB} \sum_{k'=1}^Z C_B(k') \quad (22)$$

$$E_{A^0B}^{before} = V_{AA} \sum_{i'=1}^Z C_A^0(i') + C_A^*(i') + V_{AB} \sum_{i'=1}^Z C_B(i') + V_{AB} \sum_{k'=1}^Z C_A^0(k') + C_A^*(k') + V_{BB} \sum_{k'=1}^Z C_B(k') \quad (23)$$

Перерозподіл ймовірностей (концентрацій) розраховується після кожного кроку по часу за формулами. (17-23). В кінці будується профіль концентрацій мічених атомів. Його типова форма в упорядкованому сплаві представлена на рис. 1.

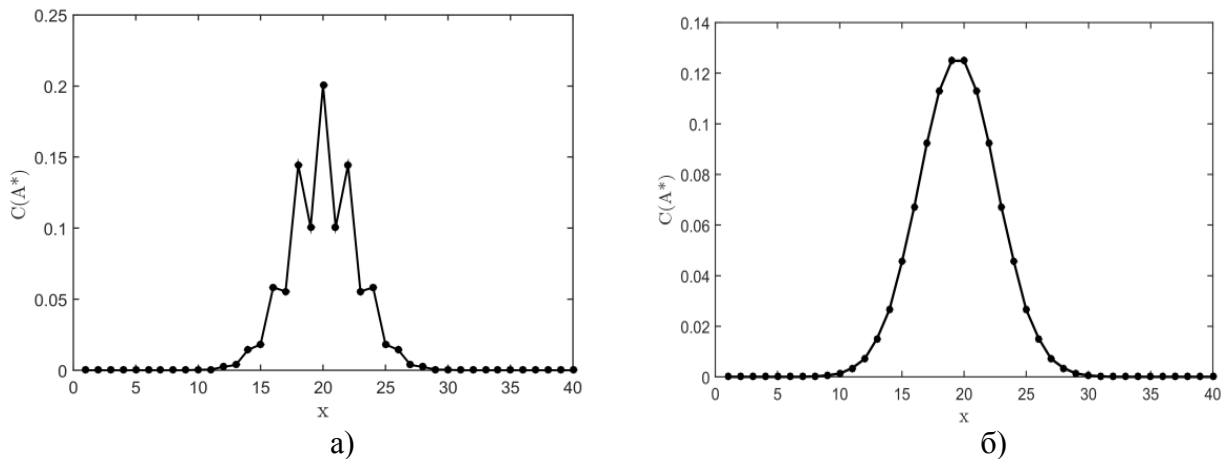


Рис. 1 Типовий профіль концентрації мічених атомів після дифузії в упорядкованому сплаві: а) профіль без усереднення, б) профіль після усереднення по двох сусідніх площинах.

Логарифм усередненого профілю концентрацій апроксимуємо лінійною залежністю від квадрату відстані поділеної на $4t$ (Рис. 2). Обернене значення тангенсу кута нахилу прямої дасть нам коефіцієнт дифузії.

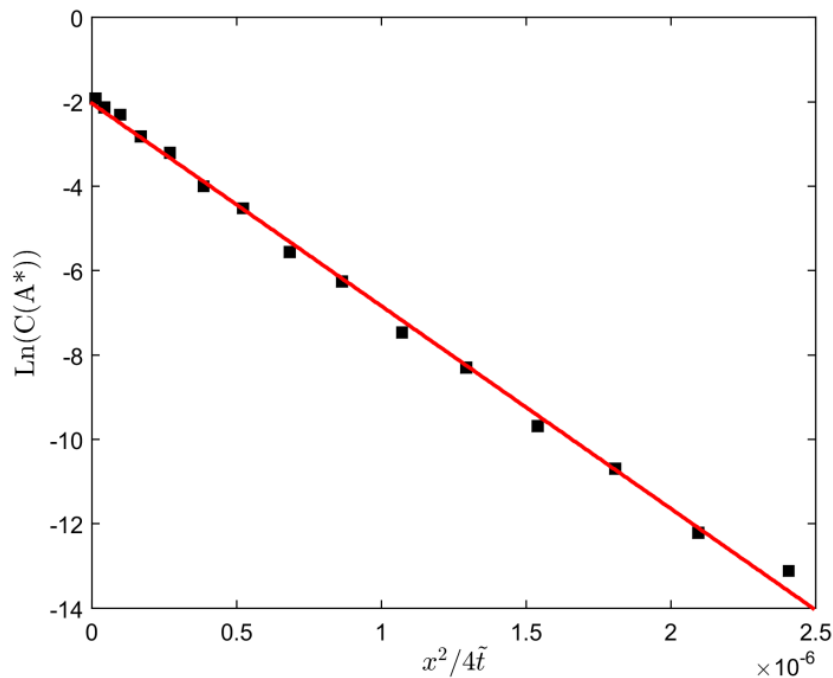


Рис. 2. Приклад залежності логарифму профілю концентрацій від відношення квадрату відстані до часу, разом із лінійною апроксимацією (час безрозмірний, відповідно до (8-9)).

Далі знайдемо коефіцієнти дифузії для ряду значень температур і побудуємо відповідну залежність. У більшості випадків залежність логарифму коефіцієнтів дифузії від приведеної оберненої температури є лінійною функцією. З тангенсу кута нахилу прямої знайдемо значення активаційної енергії заданого компоненту. У загальному випадку, зокрема для упорядкованого сплаву, активаційна енергія може нелінійно залежати від параметру порядку, що в свою чергу, залежить від температури, звідси, активаційна енергія буде також залежною від температури.

Метод SKMF, як і КМС, має деяку двозначність у визначенні часової шкали і енергій в сідловій точці. У наших розрахунках ми приймали енергію в сідловій точці константою рівною нулю, але насправді це значення є підгоночним параметром. Воно може бути знайдене при порівнянні з енергією активації одного з компонентів. Крім того, використовуючи безрозмірний час відповідно до формул (8 - 9), енергія активації повинна бути зміщена на значення $E^{saddle} - (V_{AB} + V_{BB}) \cdot Z$. Після цього, може бути знайдене реальне значення енергії активації обох компонент, і також енергія активації впорядкування заданої моделі.

$$\begin{aligned}
 Q_A^{real} &= Q_A^{simulated} + E^{saddle} - V_{AB} + V_{BB} \cdot Z, \\
 Q_B^{real} &= Q_B^{simulated} + E^{saddle} - V_{AB} + V_{BB} \cdot Z, \\
 Q_{ordering}^{real} &= Q_{ordering}^{simulated} + E^{saddle} - V_{AB} + V_{BB} \cdot Z.
 \end{aligned}
 \tag{24}$$

1.2 Вакансійний механізм дифузії.

В попередньому пункті розділу був розглянутий обмінний механізм дифузії мічених атомів, який однак, є доволі штучним. Звичайно, в більшості випадків для металевих систем вакансійний механізм дифузії є більш реалістичним. Тому модифікуємо метод SKMF з міченими атомами для вакансійного механізму, вводячи в рівняння обміни компонентів з вакансіями замість обмінів компонентів між собою:

$$\begin{aligned} \frac{dC_v(i)}{dt} = & -C_v(i) \sum_{k=1}^Z C_A^*(k) + C_A^0(k) \Gamma_{ki}^{AV} - C_v(i) \sum_{k=1}^Z C_B(k) \Gamma_{ki}^{BV} + \\ & + C_A^*(i) + C_A^0(i) \sum_{k=1}^Z C_v(k) \Gamma_{ik}^{AV} + C_B(i) \sum_{k=1}^Z C_v(k) \Gamma_{ik}^{BV} \end{aligned} \quad (25)$$

$$\frac{dC_B(i)}{dt} = -C_B(i) \sum_{k=1}^Z C_v(k) \Gamma_{ik}^{BV} + C_v(i) \sum_{k=1}^Z C_B(k) \Gamma_{ki}^{BV}, \quad (26)$$

$$\frac{dC_A^*(i)}{dt} = -C_A^*(i) \sum_{k=1}^Z C_v(k) \Gamma_{ik}^{AV} + C_v(i) \sum_{k=1}^Z C_A^*(k) \Gamma_{ki}^{AV}, \quad (27)$$

$$\frac{dC_A^0(i)}{dt} = -C_A^0(i) \sum_{k=1}^Z C_v(k) \Gamma_{ik}^{AV} + C_v(i) \sum_{k=1}^Z C_A^0(k) \Gamma_{ki}^{AV} \quad (28)$$

Оскільки вакансії набагато більш рухливіші, ніж атоми (при концентрації вакансій $1e-6$, вакансії в мільйон разів більш мобільні ніж атоми), еволюція вакансійної підсистеми відбувається набагато швидше, ніж у основних компонентів А(В). Це означає, що для прямого чисельного розв'язку рівнянь з вакансіями, потрібен в мільйон разів менший крок по часу, ніж у випадку обмінного механізму. Це робить побудову концентраційного профілю мічених атомів практично неможливою, через обмеження часу обчислень. У вакансійному механізмі дифузії можна розглядати ланцюжки ієрархій процесів і характеристичних часів, яка була детально розглянута Боголюбовим [11]. Швидкий процес (з малим часом релаксації) зазвичай підлаштовується під повільніший процес (з більшим часом релаксації), отже для швидкого процесу можна використати наближення квазістаціонарності. Тому, використовуючи ідеї Гурова [12], пропонується використати наближення квазістаціонарності для вакансій, щоб підлаштувати зміну профілю вакансій до повільної зміни концентраційного профілю основних компонент [13], [14]. В результаті для розрахунку квазістаціонарного розподілу вакансій з введеними міченими атомами матимемо наступну ітераційну процедуру:

$$C_v^{iter+1}(i) = \frac{C_A^*(i) + C_A^0(i) \sum_{k=1}^Z C_v^{iter}(k) \Gamma_{ik}^{AV} + C_B(i) \sum_{k=1}^Z C_v^{iter}(k) \Gamma_{ik}^{BV}}{\sum_{k=1}^Z C_A^*(k) + C_A^0(k) \Gamma_{ki}^{AV} + C_B(k) \Gamma_{ki}^{BV}} \quad (29)$$

Щоб задовольнити обмеження незмінності середньої концентрації вакансій, виконаємо ренормалізацію концентрації вакансій на кожному ітераційному кроці:

$$C_v^{iter+1}(i) = \frac{S_0}{S} C_v^{iter+1}(i), \quad S = \sum C_v^{iter+1}, \quad S_0 = \sum C_v^0 \quad (30)$$

Ітераційний процес буде продовжуватись до виконання умови збіжності:

$$|\bar{C}_v^{iter+1} - \bar{C}_v^{iter}| < \varepsilon$$

Формули для частот і енергій матимуть наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ki}^{AV} &= \nu_{0A} \exp\left(-\frac{E^{saddle} - E_{AV}^{before}}{kT}\right), \\ \Gamma_{ki}^{AV} &= \nu_{0A} \exp\left(-\frac{E^{saddle} - E_{BV}^{before}}{kT}\right), \end{aligned} \tag{31}$$

Якщо припустити, що взаємодія компонентів з вакансіями і вакансій між собою рівна нулю (наприклад при параметрах з [15], які були використані далі), то отримуємо:

$$E_{AV(k \rightarrow i)}^{before} = \sum_{k'=1}^Z C_A^0(k') + C_A^*(k') V_{AA} + C_B(k') V_{AB}, \tag{32}$$

або в іншому вигляді:

$$E_{AV(k \rightarrow i)}^{before} = ZV_{AB} + V_{AA} - V_{AB} \sum_{k'=1}^Z C_A^0(k') + C_A^*(k') \tag{33}$$

$$E_{AV(k \rightarrow i)}^{before} = ZV_{AB} - V - M \sum_{k'=1}^Z C_A^0(k') + C_A^*(k'),$$

$$E_{BV(k \rightarrow i)}^{before} = ZV_{AB} + V_{BB} - V_{AB} \sum_{k'=1}^Z C_B(k'), \tag{34}$$

$$E_{BV(k \rightarrow i)}^{before} = ZV_{AB} - V + M \sum_{k'=1}^Z C_B(k').$$

Подібно до випадку з обмінним механізмом, тут також можна ввести безрозмірні параметри:

$$\begin{aligned} \Gamma_{k,i} A \leftrightarrow V &= \Gamma_0 \tilde{\Gamma}_{k,i} A \leftrightarrow V \\ \Gamma_{k,i} B \leftrightarrow V &= \Gamma_0 \tilde{\Gamma}_{k,i} B \leftrightarrow V \end{aligned} \tag{35}$$

Де безрозмірні частоти і передекспоненційний множник будуть рівні:

$$\tilde{\Gamma}_{k,i} A \leftrightarrow V = \sqrt{\frac{\nu_{0A}}{\nu_{0B}}} \exp\left(-\frac{V - M \sum_{in=1}^Z C_A(n)}{kT}\right) \tag{36}$$

$$\tilde{\Gamma}_{k,i} \left(\mathbf{E} \leftrightarrow V \right) \equiv \sqrt{\frac{V_{0B}}{V_{0A}}} \exp \left(- \frac{E + M \sum_{in=1}^Z C_B \langle n \rangle}{kT} \right) \quad (37)$$

$$\Gamma_0 = \sqrt{V_{0A} V_{0B}} \cdot \exp \left(- \frac{E^{saddle} - V_{ab} \cdot Z}{kT} \right), \quad (38)$$

а безрозмірний час визначатиметься як

$$\tilde{t} \equiv \Gamma_0 t \quad (39)$$

2 SKMF метод – застосування дифузії мічених атомів до впорядкування в системі Ni₃Al

2.1 Визначення параметру порядку в методі SKMF

Коректність даного методу для термодинаміки і кінетики впорядкування в ГЦК сплавах була перевірена і доведена в роботі [16]. Звичайно, застосування SKMF, як і будь-якої теорії середнього поля (без урахування кореляції) обмежена, оскільки наближення середнього поля не враховує ближній порядок.

У структурах L1₂ (наприклад Ni₃Al) локальний дальний порядок в невеликому кластері із заданого вузла і його найближчих сусідів визначається відповідно до стандартних рівнянь:

$$\eta = \frac{p_A^I - C_A}{1 - v^I} = \frac{p_B^{II} - C_B}{1 - v^{II}} \quad (40)$$

де

$$p_A^I \langle \mathbf{E} \rangle = \frac{N_A^I \langle \mathbf{E} \rangle}{N^I \langle \mathbf{E} \rangle} \quad \text{і} \quad v^{I(II)} = \frac{N^I \langle \mathbf{E} \rangle}{N^I + N^{II}}, \quad (41)$$

що виражають ймовірність знаходження атому типу А(В) в I(II) підрешітці і частку вузлів I(II) підрешітки відповідно. Визначаючи локальний аналог дальнього параметру порядку (30) для методу SKMF, потрібно розглядати кластери, які мають таку ж частку атомних компонентів і вакансій, що і весь кристал. Одночасно з цим, потрібно також враховувати, що вузли з одного кластеру можуть одночасно належати кільком сусіднім кластерам. Тоді частка вузлів певної підрешітки $v^{I(II)}$ може бути обчислена відповідно до (41) за наступною формулою:

$$N^I = \sum_{i1=1}^{M^I} 1 / share(i1), \quad N^{II} = \sum_{i2=1}^{M^{II}} 1 / share(i2) \quad , \quad (42)$$

де сумування відбувається по всіх вузлах M^I (M^{II}) підрешітки, що повністю або частково належать кластеру, $share(i)$ – число сусідніх кластерів, які ділять між собою i -тий вузол, таким чином що, $1 / share(i)$ є часткою вузла i у кластері. Звідси локальну атомну концентрацію можна буде визначити як:

$$C_A = \frac{\sum_{i1=1}^{M^I} C_A \langle 1 \rangle share(i1) + \sum_{i2=1}^{M^{II}} C_A \langle 2 \rangle share(i2)}{N^I + N^{II}}, \quad (43)$$

$$C_B = \frac{\sum_{i1=1}^{M^I} C_B \langle 1 \rangle share(i1) + \sum_{i2=1}^{M^{II}} C_B \langle 2 \rangle share(i2)}{N^I + N^{II}}$$

Апріорні ймовірності для підрешіток із зайнятими атомами А і В будуть обчислені за формулами:

$$P_A^I = \frac{\sum_{i1=1}^{M^I} C_A \langle 1 \rangle share(i1)}{N^I}, \quad P_B^{II} = \frac{\sum_{i2=1}^{M^{II}} C_A \langle 2 \rangle share(i1)}{N^{II}} \quad (44)$$

Виберемо кластер, який складатиметься з центрального вузла і 12 його найближчих сусідів. Такий вибір найменшого можливого кластеру, найкраще підходить для систем з різким градієнтом концентрації. Один з кластерів містить центральний вузол ($share = 1$) і 12 граничних вузлів ($share = 4$), кожен з граничних вузлів буде спільним для чотирьох сусідніх кластерів. Тому, загальне число незалежних вузлів буде $N^I + N^{II} = N = 1 + 12/4 = 4$. Центральний вузол має належати до одної з 4 простих кубічних гратниць, які формують ГЦК гратницю. Три прості кубічні гратници формують підрешітку більшості в структурі $L1_2$, четверта проста кубічна гратниця є підрешіткою меншості цієї структури. Для кожного випадку, потрібно буде обчислити свій власний локальний параметр дальнього порядку.

Як було згадано вище, кожен вузол апіорі має належати 4 простим кубічним гратницям ГЦК гратници. Звичайно, у загальному, всі 4 випадки мають бути перевірені і порівняні. А саме, якщо вузол i розглядається, як такий, що належить підрешітці більшості суперструктури $L1_2$ та зайнятий компонентом більшості, тоді існує 3 способи вибрати дві площини з трьох взаємоперпендикулярних площин підрешітки більшості, які містять даний вузол. Кожен з варіантів вибору відповідає певному значенню локального параметру порядку. Кожен із цих локальних параметрів порядку може бути обчислений, залежно від вибору 8 сусідніх вузлів (із 12), що належать тій самій підрешітці.

$$\eta_{1,2,3}^I(i) = \frac{C_A(i) + \frac{1}{4} \sum_{nn=1}^8 C_A(nn)}{3} - \frac{C_A(i) + \frac{1}{4} \sum_{nn=1}^{12} C_A(nn)}{4} \quad (45)$$

$$1 - 3/4$$

Якщо вузол, що розглядається, належить підрешітці меншості, то локальний параметр дальнього порядку визначається як

$$\eta_4^{II}(i) = \frac{C_A(i) - \frac{C_A(i) + \frac{1}{4} \sum_{nn=1}^{12} C_A(nn)}{4}}{1 - 1/4} \quad (46)$$

Можна легко перевірити, що локальний параметр дальнього порядку, який визначається для кожного вузла рівний 1 у випадку ідеального порядку, за умови, що підрешітки вибрані належним чином. У випадку некоректного вибору підрешіток значення η від'ємне і рівне $-1/3$.

Єдиним правильним параметром порядку з чотирьох обчислених для заданого вузла i , буде той, що матиме найбільше значення по модулю.

2.2 Застосування SKMF до впорядкування в структурі Ni₃Al

Для того, щоб уникнути утворення та подальшої конкуренції антифазних доменів, дослідження кінетики упорядкування завжди починалось з однорідної і ідеально впорядкованої структури (тобто при $T \sim 0$ K). Потім температура миттєво збільшувалась до деякого більш високого значення, і домен частково розупорядкувався, що призводило до нового ступеня параметру дальнього порядку. Після того як система врівноважувалась, процедура повторювалась знову для іншої вибраної температури. Розрахунки починались з рівномірно розподіленою довільною концентрацією вакансій (ймовірність для кожного вузла). Під час процесу впорядкування, вакансії перерозподілялись між підрешітками.

Процедуру, описану в пунктах 1.1 та 1.2, було застосовано для моделювання системи A₃B, яка імітує інтерметалід Ni₃Al. Енергії парної взаємодії $V_{AA} = -0.3$ eV, $V_{BB} = -0.15$ eV і $V_{AB} = -0.295$ eV, використані в моделюванні, були взяті з [15], для відтворення властивостей фази γ -Ni₃Al.

Моделювання з реалізацією обмінного механізму дифузії. При проведенні моделювання для ряду вибраних температур було отримано залежність (по Ареніусу) для коефіцієнтів дифузії мічених атомів обох компонентів А (більшість – Ni) і В (меншість – Al) показану на рис. 4. Їхні кутові коефіцієнти $a^{Arrhenius}$ пов'язані з термодинамічними енергіями активації Q_A і Q_B дифузії мічених атомів А- і В-компонент відповідно до рівняння (4.10).

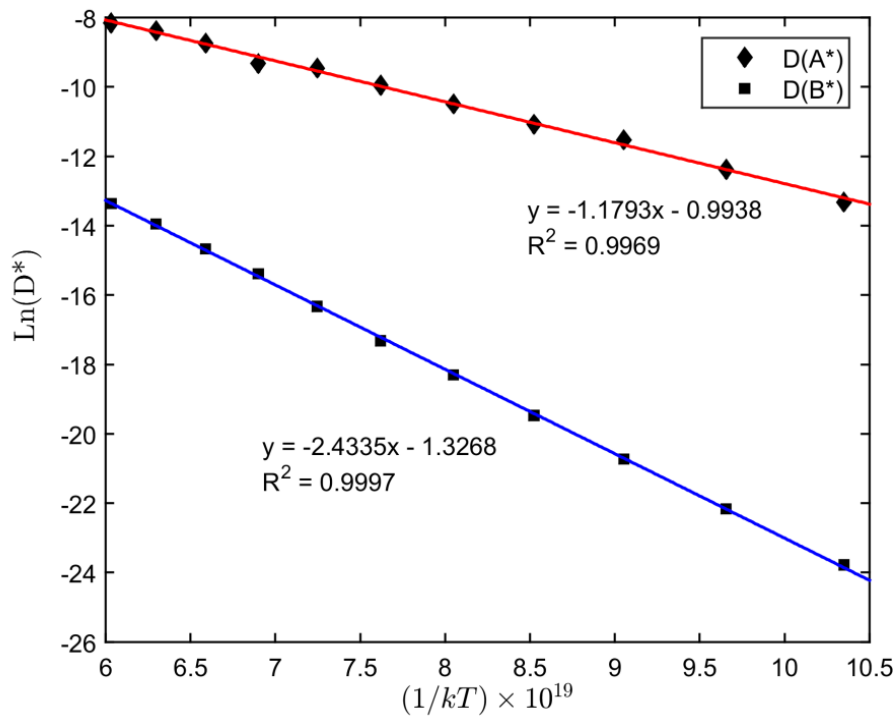


Рис. 4. Залежність коефіцієнтів дифузії мічених атомів компонентів А і В у системі A₃B (Ni₃Al) для випадку обмінного механізму дифузії.

Виходячи з рівняння (24), маємо:

$$\begin{aligned} Q_A &= 1.1793 \cdot 10^{-19} J + E^{saddle} - V_{AB} + V_{BB} \cdot Z \\ Q_B &= 2.4335 \cdot 10^{-19} J + E^{saddle} - V_{AB} + V_{BB} \cdot Z \end{aligned} \quad (47)$$

Ми можемо оцінити значення енергії сідлової точки, лише при порівнянні з експериментальними даними, для Ni у Ni₃Al це буде $Q_{Ni} \approx 3eV = 4.8 \cdot 10^{-19} J$ [17]. Звідси знайдемо

$$\begin{aligned} Q_{Al} &\approx 6.05 \cdot 10^{-19} J \\ Q_B / Q_A &\approx 1.27 \end{aligned} \quad (48-49)$$

Вища енергія активації при дифузії мічених атомів мінорного компоненту бінарної системи (Al у Ni₃Al) в упорядкованій L₁₂ структурі узгоджується із експериментальними результатами [3], [18]. Вищий коефіцієнт дифузії Ni і менше значення Q_{Ni} є результатом того, що Ni може дифундувати в межах власної підрешітки, а атоми мінорного компоненту можуть мігрувати лише стрибками в іншу підрешітку або через антифазні дефекти підрешітки більшості.

В ході SKMF моделювання кінетики упорядкування було також знайдено, що релаксаційна ізотерма наближується функцією тільки з одною експонентою:

$$\frac{\eta - \eta_{\infty}}{1 - \eta_{\infty}} = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (50)$$

Графік безрозмірного релаксаційного часу τ (Рис. 5) відображає стандартну температурну залежність:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{Q^{ordering}}{kT}\right) \quad (51)$$

Кутовий коефіцієнт $a^{Arrhenius} = 2.32 \times 10^{-19} J$ на рис. 5, зв'язаний з термодинамічною енергією активації $Q^{ordering}$ кінетики впорядкування відповідно до рівняння (24).

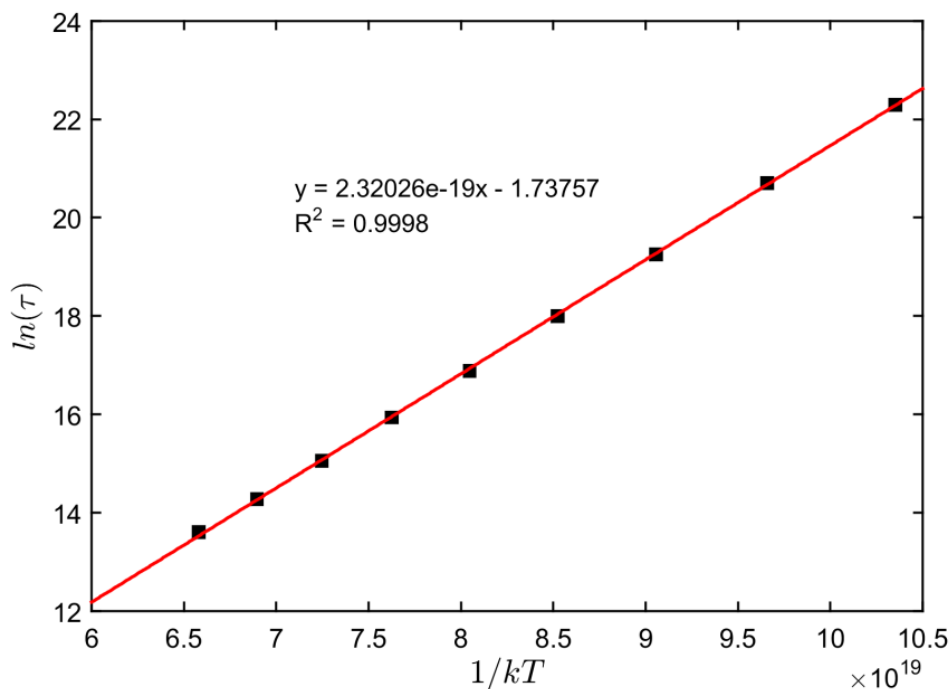


Рис. 5. Релаксація часу для кінетики впорядкування у системі A₃B (Ni₃Al) у випадку обмінного механізму дифузії.

Використовуючи оцінку (24), отримаємо значення:

$$Q_{ordering} = 2.32 \cdot 10^{-19} J + E^{saddle} - (C_{AB} + V_{BB}) \cdot Z \approx 5.9 \cdot 10^{-19} J, \quad (52)$$

яке показує, що енергія активації для кінетики впорядкування у впорядкованій бінарній структурі $L1_2$ досить близьке до енергії активації мічених атомів меншості (B^*).

Моделювання з реалізацією вакансійного механізму дифузії. Для моделювання було взято фіксоване значення середньої концентрації вакансій $\bar{C}_v = 10^{-4}$, з яким було повторено процедуру, аналогічно до випадку з обмінним механізмом. В результаті отримано графік залежності (по Ареніусу) коефіцієнтів дифузії компонентів А і В (Рис. 6).

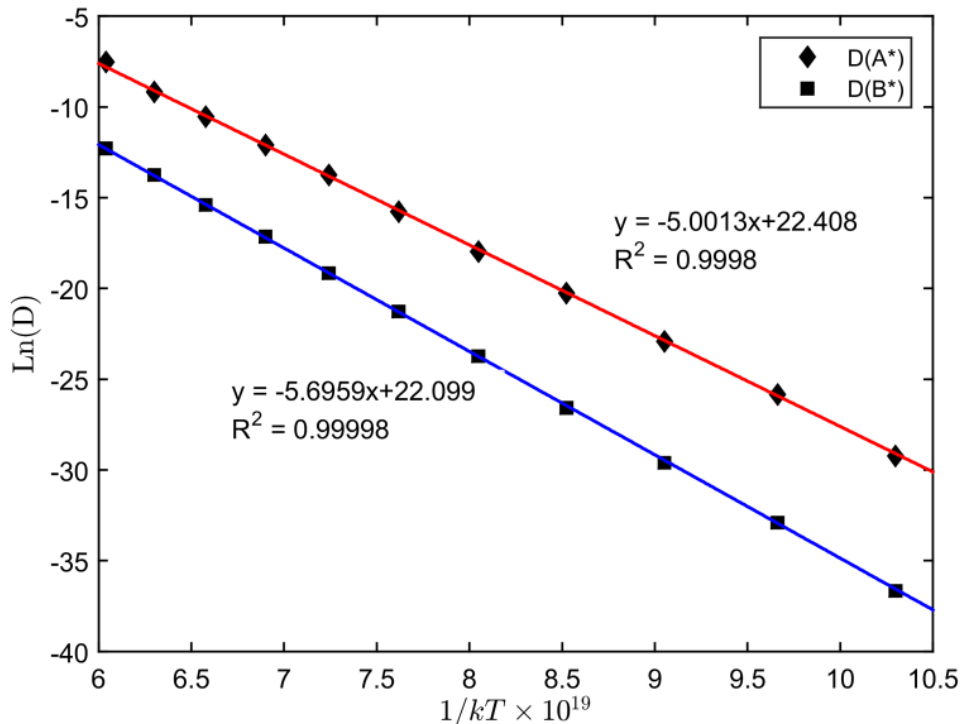


Рис. 6. Залежність коефіцієнтів дифузії мічених атомів у A_3B (Ni_3Al) для випадку вакансійного механізму дифузії.

Термодинамічна енергія активації Q_A для мічених атомів компоненту А має бути скорегована виходячи з експериментального значення Q_{Ni} , додаванням величини ΔE^{saddle} до кутового коефіцієнта $a^{Arrhenius}$ прямої показаної на рис. 6.

$$Q_A \approx 5.00 \cdot 10^{-19} J + \Delta E^{saddle} \quad (53)$$

Зважаючи на значення Q_{Ni} [17] $\Delta E^{saddle} \approx -0.20 \cdot 10^{-19} J$ ми отримаємо

$$Q_B \approx 5.70 \cdot 10^{-19} J + \Delta E^{saddle} = 5.5 \times 10^{-19} eV \Rightarrow Q_B > Q_A \quad (54)$$

що якісно узгоджується з отриманими результатами для випадку обмінного механізму дифузії.

Типовий приклад релаксації впорядкування показаний на рис.7.

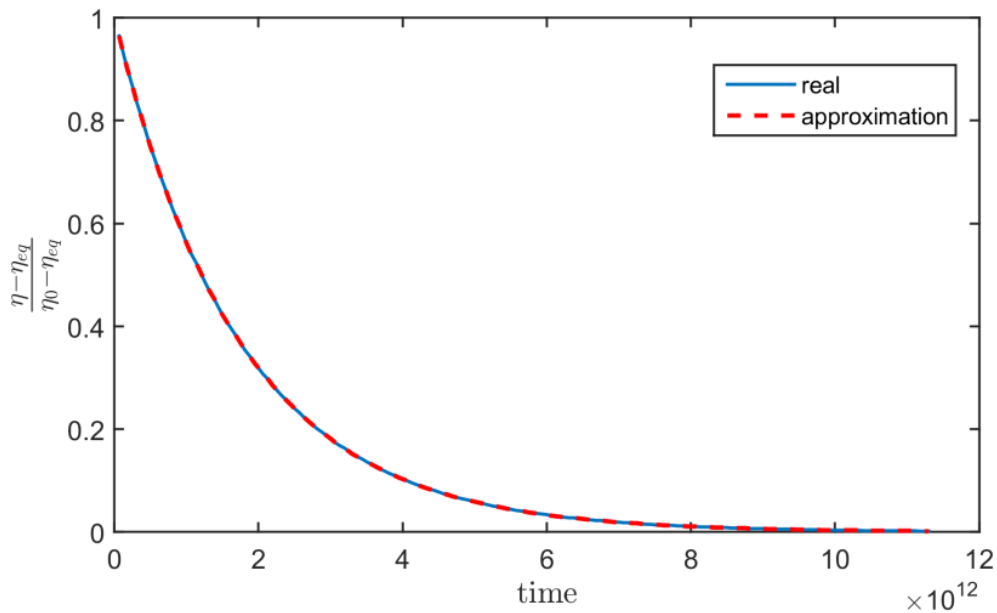


Рис. 7. Релаксація впорядкування в бінарній системі A_3B (Ni_3Al) змодельована при температурі $T = 800$ К для випадку вакансійного механізму дифузії.

Було встановлено, що релаксація упорядкування наближується функцією з суми двох експонент:

$$\frac{\eta - \eta_{eq}}{\eta_0 - \eta_{eq}} = A_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + A_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right) \quad (55)$$

Якісно цей результат збігається з результатами Козубського та Орамуса в [15], отриманого в ході Монте-Карло моделювання. Наприклад, для температури $T = 800$ К значення A_2 приблизно рівне 0.03, і релаксаційний час τ_2 майже в два рази коротший ніж τ_1 : $\tau_2 / \tau_1 \approx 0.54$.

Обидва релаксаційні часи τ_1 ; τ_2 задовольняють закон Ареніуса (Рис. 8):

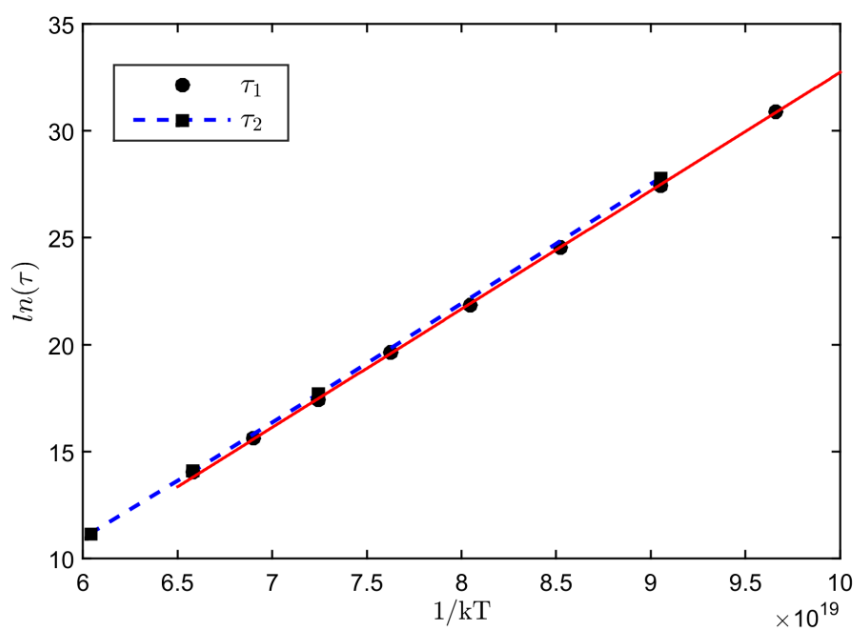


Рис. 8. Залежність релаксаційних часів τ_1 і τ_2 для кінетики впорядкування в системі A_3B (Ni_3Al) у випадку вакансійного механізму дифузії.

Після корегування енергії активації обох залежностей релаксації впорядкування, яким відповідають кутові коефіцієнти на рис. 8, отримаємо

$$\begin{aligned} Q_1^{ordering} &\approx 5.33 \cdot 10^{-19} \text{ J} \\ Q_2^{ordering} &\approx 5.36 \cdot 10^{-19} \text{ J} \end{aligned} \quad (56)$$

Аналогічно до моделювання, реалізованого з обмінним механізмом дифузії, термодинамічні енергії активації релаксації впорядкування виявились близькими по значенню до енергії активації мінорного компоненту (В) мічених атомів. Це означає, що вузьким місцем у процесі впорядкування є дифузія мінорного компоненту (компоненту меншості).

Висновки

На основі методу SKMF було побудовано його модифікацію для проведення моделювання дифузії мічених атомів та процесів впорядкування у бінарній системі з ГЦК гратницею, що представляє собою сплав Ni_3Al . Результати моделювання були порівняні з попередньо отриманими результатами моделювання цих же систем методами кінетичного Монте-Карло (КМС) та експериментальними даними.

У системі, змодельованій у рамках даної роботи, були використані фіксовані значення енергій парної взаємодії, наближені до рівноважних властивостей цих систем, а також значення енергії сідлової точки, які наближені до параметрів дифузії і кінетики впорядкування. Еволюція конфігурації систем в процесі дифузії було розглянуто на двох рівнях наближення: а) через простий, але малофізичний підхід обмінного механізму та б) через більш реальну модель з реалізацією вакансійного механізму дифузії. З урахуванням всіх наближень, описаних вище, тільки відносні значення оцінюваних параметрів і якісні узгодження з експериментальними результатами можна вважати суттєвими.

Моделювання дифузії мічених атомів Ni та Al у Ni_3Al дало вищий коефіцієнт дифузії для Ni, що є очікуваним ефектом, пов'язаний з легшою підрешітковою дифузією для атомів Ni в структурі $L1_2$ системи Ni_3Al . Також, вища енергія активації для мічених атомів Al і її близьке значення до енергії активації кінетики впорядкування в тій самій системі узгоджується з експериментальними даними по дифузії та кінетиці впорядкування в Ni_3Al [3].

Подяки

Робота була підтримана європейською програмою FP7-PEOPLE-2013-IRSES (грантова угода: PIRSES-GA-2013-612552), а також, грантом МОН України (грантова угода: 0115 U 000638 та 0116 U 004691).

Список використаної літератури:

1. Binder K. Introduction: Theory and “technical” aspects of Monte Carlo simulations. / K. Binder. – Springer Berlin Heidelberg, 1986.
2. Murch, G. E. Diffusion in crystalline solids. / G. E. Murch. – Academic Press, 2012.
3. Kozubski, R. Long-range order kinetics in Ni_3Al -based intermetallic compounds with $L1_2$ -type superstructure / R. Kozubski, // *Progress in materials science*, 41(1). – 1997. – pp. 1-59.
4. Martin, G. Atomic mobility in Cahn’s diffusion model / G. Martin // *Physical Review B*, 41(4). – 1990. – p. 2279.
5. Erdélyi, Z. Interface sharpening instead of broadening by diffusion in ideal binary alloys / Z. Erdélyi, I. A. Szabó, & D. L. Beke // *Physical review letters*, 89(16). – 2002. – 165901.

6. Erdélyi, Z. Transient interface sharpening in miscible alloys / Erdélyi, Z., Sladeczek, M., Stadler, L. M., Zizak, I., Langer, G. A., Kis-Varga, M., & Sepiol, B. // *Science*, 306(5703). – 2004. – p. 1913-1915.
7. Erdélyi, Z. Nonparabolic nanoscale shift of phase boundaries in binary systems with restricted solubility / Z. Erdélyi, G. L. Katona & D. L. Beke // *Physical Review B*, 69(11). – 2004. – 113407.
8. Erdélyi, Z. Dissolution and off-stoichiometric formation of compound layers in solid state reactions / Z. Erdélyi, D. L. Beke & A. Taranovskyy // *Applied Physics Letters*, 92(13). – 2008. – 133110.
9. Storozhuk, N. V. Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion / N. V. Storozhuk, K. V. Sopiga & A. M. Gusak // *Philosophical Magazine*, 93(16). – 2013. – p. 999-2012.
10. Erdélyi, Z. Stochastic kinetic mean field model / Erdélyi, Z., Pasichnyy, M., Bezpachuk, V., Tomán, J. J., Gajdics, B., & Gusak, A. M. // *Computer Physics Communications*, 204. – 2016. – p. 31-37.
11. Bogolyubov, N. N. The dynamical theory in statistical physics. – Hindustan, 1965
12. Gurov, K. P. A Description of Interdiffusion in Alloys With an Arbitrary Capacity of Vacancy Sinks / K. P. Gurov & A. M. Gusak // *Fiz. Met. Metalloved.*, 59(6). – 1985. – pp. 1062-1066.
13. Rymar, O. M. Role of nonequilibrium vacancies at interdiffusion in a crystal without sinks / O. M. Rymar & A. M. Gusak // *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 349(16). – 2016.
14. Безпальчук, В. М. Узагальнення кінетичного середньопольового методу на вакансійний механізм та його застосування до опису спинодального розпаду / В. М. Безпальчук & А. М. Гусак // *Металлофізика и новейшие технологии*, (37, № 12). – 2015. – С. 1583-1593.
15. Oramus, P. Monte Carlo computer simulation of order-order kinetics in the L1 2-ordered Ni 3 Al binary system / P. Oramus, R. Kozubski, V. Pierron-Bohnes, M. C. Cadeville & W. Pfeiler // *Physical Review B*, 63(17). – 2001. – pp. 174109.
16. Bezpachuk V. □ M. Application of the Stochastic Kinetic Mean Field model (SKMF) to ordering in macro- and nanosystems with FCC lattice / V. □ M. Bezpachuk, M.O. Pasichnyy, A. □ M. Gusak // *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 38. – 2016. – pp. 1135-1144
17. Frank, S. T. Self- Diffusion of Ni in Single and Polycrystals of Ni3Al. A Study of SIMS and Radiotracer Analysis / S. T. Frank, U. Södervall & C. Herzig // *Physica status solidi (b)*, 191(1). – 1995. – pp. 45-55.
18. Divinski, S.V. Solute diffusion of Al-substituting elements in Ni3Al and the diffusion mechanism of the minority component / S.V. Divinski, S. T. Frank, U. Södervall & Ch. Herzig // *Acta Mater.* 46. – 1998. – p. 4369

References:

1. Binder, K. (1986). Introduction: Theory and “technical” aspects of Monte Carlo simulations. In *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (pp. 1-45). Springer Berlin Heidelberg.
2. Murch, G. E. (2012). *Diffusion in crystalline solids*. Academic Press.
3. Kozubski, R. (1997). Long-range order kinetics in Ni 3 Al-based intermetallic compounds with L1 2-type superstructure. *Progress in materials science*, 41(1), 1-59.
4. Martin, G. (1990). Atomic mobility in Cahn’s diffusion model. *Physical Review B*, 41(4), 2279.
5. Erdélyi, Z., Szabó, I. A., & Beke, D. L. (2002). Interface sharpening instead of broadening by diffusion in ideal binary alloys. *Physical review letters*, 89(16), 165901.
6. Erdélyi, Z., Sladeczek, M., Stadler, L. M., Zizak, I., Langer, G. A., Kis-Varga, M., ... & Sepiol, B. (2004). Transient interface sharpening in miscible alloys. *Science*, 306(5703), 1913-1915.

7. Erdélyi, Z., Katona, G. L., & Beke, D. L. (2004). Nonparabolic nanoscale shift of phase boundaries in binary systems with restricted solubility. *Physical Review B*, 69(11), 113407.
8. Erdélyi, Z., Beke, D. L., & Taranovsky, A. (2008). Dissolution and off-stoichiometric formation of compound layers in solid state reactions. *Applied Physics Letters*, 92(13), 133110.
9. Storozhuk, N. V., Sopiga, K. V., & Gusak, A. M. (2013). Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion. *Philosophical Magazine*, 93(16), 1999-2012.
10. Erdélyi, Z., Pasichnyy, M., Bezpachuk, V., Tomán, J. J., Gajdics, B., & Gusak, A. M. (2016). Stochastic kinetic mean field model. *Computer Physics Communications*, 204, 31-37.
11. Bogolyubov, N. N. (1965). The dynamical theory in statistical physics.
12. Gurov, K. P., & Gusak, A. M. (1985). A Description of Interdiffusion in Alloys With an Arbitrary Capacity of Vacancy Sinks. *Fiz. Met. Metalloved.*, 59(6), 1062-1066.
13. Rymar, O. M., & Gusak, A. M. (2016). Role of nonequilibrium vacancies at interdiffusion in a crystal without sinks. *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 349(16).
14. V. M. Bezpachuk and A. M. Gusak (2015). Generalization of the Kinetic Mean Field Method for Vacancy Diffusion Mechanism and Application of It to Spinodal Decomposition, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 37, № 12: 1583-1593
15. Oramus, P., Kozubski, R., Pierron-Bohnes, V., Cadeville, M. C., & Pfeiler, W. (2001). Monte Carlo computer simulation of order-order kinetics in the L1₂-ordered Ni₃Al binary system. *Physical Review B*, 63(17), 174109.
16. V. M. Bezpachuk, M. O. Pasichnyy, A. M. Gusak Application of the Stochastic Kinetic Mean Field model (SKMF) to ordering in macro- and nanosystems with FCC lattice, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 38, (2016), 1135-1144.
17. Frank, S. T., Södervall, U., & Herzig, C. (1995). Self-Diffusion of Ni in Single and Polycrystals of Ni₃Al. A Study of SIMS and Radiotracer Analysis. *Physica status solidi (b)*, 191(1), 45-55.
18. Divinski, S.V., Frank, S. T., Södervall, U., & Herzig, Ch. (1998). Solute diffusion of Al-substituting elements in Ni₃Al and the diffusion mechanism of the minority component *Acta Mater.* 46, 4369.

Summary

V. Bezpachuk, O. Bogatyrev, A. Gusak

SIMULATION OF TRACER DIFFUSION AND ORDERING KINETICS IN L₁₂ SUPERSTRUCTURE

Introduction

Tracer diffusion and chemical ordering processes in two FCC binary systems mimicking Ni₃Al and FePt were simulated by means of the Kinetic Mean Field (KMF) method. Some of the results were compared with the ones previously obtained by simulating the same systems with atomistic Monte Carlo algorithms.

Kinetic equations formulated within the KMF technique, as originally proposed by G. Martin in 1990, describe the time evolution of configuration parameters which having a local character are, however, averaged over macroscopic parts of the system (crystallographic planes, sublattices etc.). Moreover, none of the known realization of the KMF method goes beyond the point approximation – i.e. the atomic configurations are parameterized by average site concentrations. In this way, any correlation effects are definitely beyond the current version of the method.

Purpose

The research aims at the development of the KMF based tracer diffusion method, chemical ordering and tracer diffusion simulation processes in FCC binary system.

Results

This original method was modified to model tracer diffusion. (for two cases – exchange and vacancy mechanism). As in KMF, we cannot trace the trajectory of individual atoms (as e.g. in Monte Carlo simulations), therefore, we cannot use Einstein relation for mean squared displacements of tracers. Instead, we used the well-known analytical solution for the point source.

Denoting: $C_{A(B)}$ – total A(B)-atom concentration, $C_{A(B)}^0$ – A(B) - atom concentration, $C_{A(B)}^*$ – A(B) tracer concentration, we have:

$$\begin{aligned} C_A &= C_A^* + C_A^0 \\ C_B &= 1 - C_A^0 - C_A^* \end{aligned}$$

One expects the following time dependence of the locally averaged $C_A^*(X)$ profile:

$$\ln C_{A(B)}^*(X) \approx \text{const} - \frac{1}{4D_{A(B)}^* t} X^2,$$

where X denotes the distance from the center of the layer originally occupied by the tracer atoms. The slope of $\ln C_{A(B)}^*(X)$ vs. X^2 yields the diffusivity scaled with respect to the simulation time units.

The modelling by this developed method of Ni- and Al-tracer diffusion in Ni_3Al yielded higher diffusivity of Ni – the effect anticipated in most of the related investigations due to easy intrasublattice diffusion channel for Ni in the $L1_2$ superstructure of Ni_3Al . In contrary to the experimental investigations suffering from a lack of practically applicable Al* tracers, the simulations made it possible to model the process directly. In addition, the higher thermodynamic activation energy for the Al* -tracer diffusion and its value close to the simulated thermodynamic activation energy for the “order-order” kinetics in the same system is in agreement with the experimental results concerning “order-order” kinetics and tracer diffusion of admixtures substituting for Al in Ni_3Al .

Conclusion

It is interesting that the simulated “order-order” relaxations in Ni_3Al showed either one or two time scales depending on whether the “direct exchange” or vacancy mechanism for atomic migration was implemented. The presence of the two-time scales might recall the results obtained for Ni_3Al by means of atomistic MC simulation.

Keywords: tracer diffusion, ordering, mean-field method, vacancies, atomistic modeling.

Стаття надійшла 20.05.2016
Прийнято до друку 27.05.2016