

P. ORAMUS *, A. BIBORSKI*, R. KOZUBSKI*, K. PARLIŃSKI **, P. T. JOCHYM **

SUPERSTRUCTURE STABILITY AND SITE PREFERENCES IN β -NiAl DOPED WITH Fe, Co AND Cr. MONTE CARLO SIMULATION

STABILNOŚĆ NADSTRUKTURY ORAZ PREFERENCJE OBSADZEŃ PODSIECI PRZEZ DOMIESZKI Fe, Co i Cr WPROWADZANE DO ZWIĄZKU β -NiAl. SYMULACJE MONTE CARLO

The formation energies of single point defects and pairs of point defects in B2-ordered NiAl-C (C = Fe, Co, Cr) intermetallic compound were calculated “ab initio” within the density functional theory. Subsequently, effective nearest-neighbour (nn) atomic pair-interaction energy parameters in the systems were estimated by interpreting the “ab-initio” calculated energies in terms of Ising Hamiltonian. The parameters were then used in Monte Carlo (MC) simulations of equilibrium distributions of ternary-admixture atoms C over the NiAl-C superstructure at non-zero temperatures. Three variants of C-atom substitution were applied: (i) substitution for Ni atoms; (ii) substitution for Al-atoms; (iii) equivalent substitution for both Ni and Al atoms. Admixture of Fe and Co atoms to NiAl according to variants (i) and (iii) resulted in an increase of B2-superstructure stability; in the remaining cases the superstructure was always destabilised. The simulations showed particular site-occupation preferences of C atoms in NiAl and the competition between chemical ordering and the drift of C-atoms towards preferred lattice sites. Immiscibility of Cr atoms in NiAl showed-up as a strong clusterisation tendency of these atoms.

Keywords: nickel aluminides, based on NiAl; order/disorder transformations; site occupancy; simulations, Monte Carlo

Energie tworzenia pojedynczych defektów punktowych oraz ich par w układach NiAl-C (C = Fe, Co, Cr) z nadstrukturą typu B2 obliczono “z pierwszych zasad” metodą funkcjonału gęstości. Energie te, poprzez przyrównanie ich wartości do odpowiednich formuł wynikających z modelu Isinga, posłużyły do wyznaczenia efektywnych wartości parametrów oddziaływania par atomów w pierwszej strefie koordynacyjnej badanych układów. Parametrów tych użyto następnie w dynamicznych symulacjach Monte Carlo temperaturowych zależności równowagowych rozkładów atomów domieszki C w nadstrukturze układów NiAl-C przy zastosowaniu 3 wariantów podstawiania atomów domieszki: (i) za atomy Ni; (ii) za atomy Al; (iii) w równej proporcji za atomy Ni i Al. Stwierdzono, iż wprowadzenie domieszek do badanych układów wpływa na stabilność nadstruktur: w ogólności stabilność nadstruktur ulega obniżeniu. Wyjątek stanowią przypadki NiAl-Fe oraz NiAl-Co, gdzie domieszki Fe i Co wprowadzane są wg wariantów (i) i (iii). W przypadkach tych obserwuje się zdecydowane wzmocnienie stabilności nadstruktur B2 układu. Symulacje komputerowe wykazały również konkretne preferencje obsadzeń węzłów poszczególnych podsieci nadstruktur NiAl przez atomy domieszki. Obserwowano też współzawodnictwo pomiędzy procesem porządkowania atomowego i dryfem atomów C w stronę preferowanych węzłów sieci krystalicznej. Ograniczona mieszalność atomów Cr w układzie NiAl ujawniła się w postaci silnej tendencji tych atomów do tworzenia klastrów.

* INTERDISCIPLINARY CENTRE FOR MATERIALS MODELLING, M.SMOLUCHOWSKI INSTITUTE OF PHYSICS, JAGELLONIAN UNIVERSITY, REYMONTA 4, 30-059 KRAKOW, POLAND

** THE H. NIEWODNICZAŃSKI INSTITUTE OF NUCLEAR PHYSICS, POLISH ACADEMY OF SCIENCES, RADZIKOWSKIEGO 152, 31-342 KRAKOW, POLAND