

О. М. Римар, А. М. Гусак

УРАХУВАННЯ НЕРІВНОВАЖНИХ ВАКАНСІЙ ПРИ ВЗАЄМНІЙ ДИФУЗІЇ У БЕЗСТОКОВОМУ КРИСТАЛІ

У роботі вперше представлені результати моделювання взаємної дифузії компонентів у ГЦК ґратці при синусоїдальному розподілі компонентів середньопольовим кінетичним методом, узагальненим на випадок вакансійного механізму дифузії. Представлена еволюція з часом характерних концентраційних профілів компонентів системи при різних енергіях парних взаємодій та частотних множниках. Показано, що у симетричному випадку (рівні енергії парної взаємодії А-А і В-В) відбувається утворення упорядкованої фази АВ. При введенні асиметрії у системі також спостерігається утворення впорядкованої фази АВ, але із несиметричним характером перерозподілу вакансій.

Ключові слова: середньопольовий кінетичний метод, взаємна дифузія, нерівноважні вакансії, енергетична асиметрія.

1. Вступ

Середньопольовий кінетичний метод (СКМ) у квазіодновимірному наближенні для обмінного механізму дифузії розвинув Жорж Мартен [1]. Цей метод застосували до нанорозмірних систем із значною дифузійною асиметрією (великою різницею енергій зв'язку) Золтан Ерделі та Дежо Беке [2-4].

Основним макроскопічним параметром, яким ми оперуємо у даній моделі є концентрація, якою володіє кожен елементарний об'єм, що припадає на один атом. Концентрація лежить в діапазоні $0 \leq c \leq 1$. Оскільки концентрація у кожному вузлі може відрізнитися від нуля та одиниці, то ми не можемо із стовідсотковою точністю говорити про той чи інший сорт атома у конкретному вузлі. У такому випадку виникає запитання, а який же сорт атома знаходиться у даному вузлі? На це запитання досить легко відповісти, якщо ми будемо трактувати концентрацію як імовірність атому деякого сорту перебувати у конкретному вузлі решітки. Швидкість зміни концентрації у даному вузлі визначається балансом вхідних та вихідних атомних стрибків. У випадку обмінного механізму дифузії компонентів це рівняння має такий вигляд:

$$\frac{dc_i}{dt} = -c_i \sum_{j=1}^z (1-c_j) \Gamma_{i,j} + (1-c_i) \sum_{j=1}^z c_j \Gamma_{j,i}$$

c_i – концентрація у даному вузлі, c_j – концентрація у j -му сусідньому вузлі із загального числа сусідів даного вузла z [5]. $\Gamma_{i,j}$ – частота обмінів атома i із його сусідом j .

$$\Gamma_{i,j} = \nu \exp\left(-\frac{\Delta E_{i,j}}{kT}\right); \Delta E_{i,j} = E^0 - \bar{E}_{i,j}; \bar{E}_{i,j} = E_i^A + E_j^B;$$

$$E_i^A = V_{AA} \sum_{j=1}^z c_j + V_{AB} \sum_{j=1}^z (1-c_j); E_j^B = V_{BA} \sum_{k=1}^z c_k + V_{BB} \sum_{k=1}^z (1-c_k),$$

E_i^A , E_j^B – енергії взаємодії атома А та В із їх сусідами, E^0 – енергія в сідловій точці, яка в моделі Мартена-Ерделі-Беке вважається однаковою для всіх конфігурацій, ν – передекспоненційний множник, пропорційний частоті коливань атомів.

Результати

Добре відомо, що основним механізмом дифузії у твердих тілах є вакансійний механізм. Інші механізми дифузії також можуть бути присутні разом із вакансійним, але для їх реалізації системі, зазвичай, потрібно затратити значно більше енергії. В даній роботі зроблена спроба адаптувати середньопольовий метод на випадок вакансійного механізму дифузії компонентів. Система кінетичних рівнянь при цьому набуває вигляду:

$$\frac{\partial c_V}{\partial t} = -c_V(i) \sum_{k=1}^z c_A(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{AV} - c_V(i) \sum_{k=1}^z c_B(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{BV} + c_A(i) \sum_{k=1}^z c_V(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{AV} + c_B(i) \sum_{k=1}^z c_V(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{BV} \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_A(i)}{\partial t} = -c_A(i) \sum_{k=1}^z c_V(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{AV} + c_V(i) \sum_{k=1}^z c_A(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{AV} \quad (2)$$

$$\frac{\partial c_B(i)}{\partial t} = -c_B(i) \sum_{k=1}^z c_V(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{BV} + c_V(i) \sum_{k=1}^z c_B(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{BV}, \quad (3)$$

$$\Gamma_{k \rightarrow i}^{AV} = v_{0A} \exp\left(-\frac{E_0 - E^{before}}{kT}\right); \quad E^{before} = V_{AA} \sum_{l=1}^z c_A(l) + V_{AB} \sum_{l=1}^z c_B(l),$$

$$\Gamma_{k \rightarrow i}^{BV} = v_{0B} \exp\left(-\frac{E_0 - E^{before}}{kT}\right); \quad E^{before} = V_{BA} \sum_{l=1}^z c_A(l) + V_{BB} \sum_{l=1}^z c_B(l),$$

$$\Gamma_{i \rightarrow k}^{AV} = v_{0A} \exp\left(-\frac{E_0 - E^{before}}{kT}\right); \quad E^{before} = V_{AA} \sum_{r=1}^z c_A(r) + V_{AB} \sum_{r=1}^z c_B(r),$$

$$\Gamma_{i \rightarrow k}^{BV} = v_{0B} \exp\left(-\frac{E_0 - E^{before}}{kT}\right); \quad E^{before} = V_{BA} \sum_{r=1}^z c_A(r) + V_{BB} \sum_{r=1}^z c_B(r).$$

У формулах для обчислення енергії системи до стрибка E^{before} індекси l є індексами сусідів k -го сусіда i -го атома, а індекси r є сусідами i -го сусіда k -го атома.

Оскільки концентрація вакансій у системі мала порівняно із концентрацією А та В, то при чисельному розв'язку системи із трьох диференціальних рівнянь для концентрацій c_A , c_B , c_V ми повинні вибрати крок по часу настільки малим, щоб задовольнити умову стійкості алгоритму навіть для самого швидкого компонента:

$$dt < \frac{dx^2}{2D_A}, \quad dt < \frac{dx^2}{2D_B}, \quad dt < \frac{dx^2}{2D_V}$$

Оскільки при концентрації вакансій 10^{-5} коефіцієнт дифузії вакансій приблизно в 100000 раз більший за коефіцієнти дифузії компонентів, то крок по часу необхідно вибрати в 100000 раз меншим, ніж у випадку обмінного механізму. Ця умова різко обмежує можливості алгоритму.

Ще у роботі [8] був запропонований рецепт розв'язання даної проблеми. А саме, була використана ідея Боголюбова скорочення опису при наявності ієрархії характерних часів [10]. Дійсно, оскільки вакансії набагато рухливіші за атоми, то їх розподіл у просторі встигає «підлаштуватися» під розподіл основних компонентів, який еволюціонує повільно. Математично це означає наближення квазістаціонарності по вакансіях. Тому для пришвидшення розв'язку системи рівнянь (1) – (3) нами було вирішено розглядати квазістаціонарний випадок (ліва частина рівняння (1) дорівнює нулю) для перерозподілу вакансій через даний вузол.

Отже, ми поклали ліву частину рівняння (1) рівною нулю. Рівняння, яке при цьому утворилося, ми трактуємо як основу для ітераційної процедури, коли нова

ітерація для концентрації вакансій у вузлі i визначається через попередні значення концентрації вакансій у сусідніх вузлах. Тобто, використавши умову квазістаціонарності ($\frac{\partial c_V}{\partial t} = 0$), ми отримали наступне рівняння для перерозподілу вакансій:

$$c_V^{new}(i) = \frac{c_A(i) \sum_{k=1}^z c_V^{old}(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{AV} + c_B(i) \sum_{k=1}^z c_V^{old}(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{BV}}{\sum_{k=1}^z c_A(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{AV} + \sum_{k=1}^z c_B(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{BV}} \quad (4)$$

На кожному кроці вказаної ітераційної процедури (4) при фіксованих концентраціях основних компонентів ми визначаємо різницю $c_V^{new}(i)$ та $c_V^{old}(i)$ доти, доки вона не стане меншою за ε (ми вибрали $\varepsilon = 10^{-7}$). В результаті ітерацій може не зберігатися сума концентрації вакансій навіть без дії вакансійних джерел і стоків, що було б не фізично. Тому, кожен крок ми доповнюємо процедурою перенормування. А саме, визначаємо суму (s_{new}) нових концентрацій вакансій $c_V^{new}(i)$ в ітераційній процедурі, а також суму концентрацій вакансій при ініціалізації системи (s_{old}). Далі, концентрації вакансій ми присвоюємо нове значення, яке ми множимо на $\frac{s_{old}}{s_{new}}$ та ділимо на s_{new} і оголошуємо його старим для наступної ітерації: $c_V^{old}(i) = c_V^{new}(i) \frac{s_{old}}{s_{new}}$. Як тільки ми досягли вказаної точності, відбувається вихід із ітераційної процедури. Підставляємо $c_V^{old}(i)$ у рівняння (6) та (7) і знаходимо перерозподіл компонентів А та В з часом. Ітераційна процедура виконується на кожному кроці по часу.

$$c_V^{new}(i) = \frac{c_A(i) \sum_{k=1}^z c_V^{old}(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{AV} + c_B(i) \sum_{k=1}^z c_V^{old}(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{BV}}{\sum_{k=1}^z c_A(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{AV} + \sum_{k=1}^z c_B(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{BV}}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial c_A(i)}{\partial t} = -c_A(i) \sum_{k=1}^z c_V^{old}(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{AV} + c_V^{old}(i) \sum_{k=1}^z c_A(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{AV}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial c_B(i)}{\partial t} = -c_B(i) \sum_{k=1}^z c_V^{old}(k) \Gamma_{i \rightarrow k}^{BV} + c_V^{old}(i) \sum_{k=1}^z c_B(k) \Gamma_{k \rightarrow i}^{BV}. \quad (7)$$

Всюди нижче, ми розглядаємо перерозподіл як вакансій, так і основних компонентів, вважаючи, що початковий розподіл концентрацій компонентів А та В є синусоїдальним, а початкова концентрація вакансій є всюди однакова (прийнята рівною 10^{-5}).

Експеримент №1: $V_{AA} = V_{BB} = V_{AB} = -0.09 \text{ eV}$; $v_{0A} = v_{0B} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$.

Для перевірки моделі ми вирішили провести перший комп'ютерний експеримент із однаковими енергіями парної взаємодії, нульовою енергією змішування $E^{mix} = V_{AB} - \frac{V_{AA} + V_{BB}}{2}$ та однаковими частотними множниками. Фактично, це ідеальний твердий розчин ізотопів. Як і очікувалося, ми отримали синусоїдальний закон вирівнювання концентрації компонентів А та В без перерозподілу вакансій. На рис.1. представлена еволюція концентраційних профілів з часом для компонента А та вакансій. При цьому чорна суцільна крива відповідає за початковий розподіл компонентів у системі (їй відповідає мітка 1 на рис.1), а штрих – пунктирна крива – за кінець експерименту (їй відповідає мітка 4 на рис. 1). Пунктирна та точкова криві

відносяться до проміжних етапів еволюції системи. Їм відповідають мітки 2 та 3 на рис. 1. Даних позначень ми будемо дотримуватися і далі у нашій роботі.

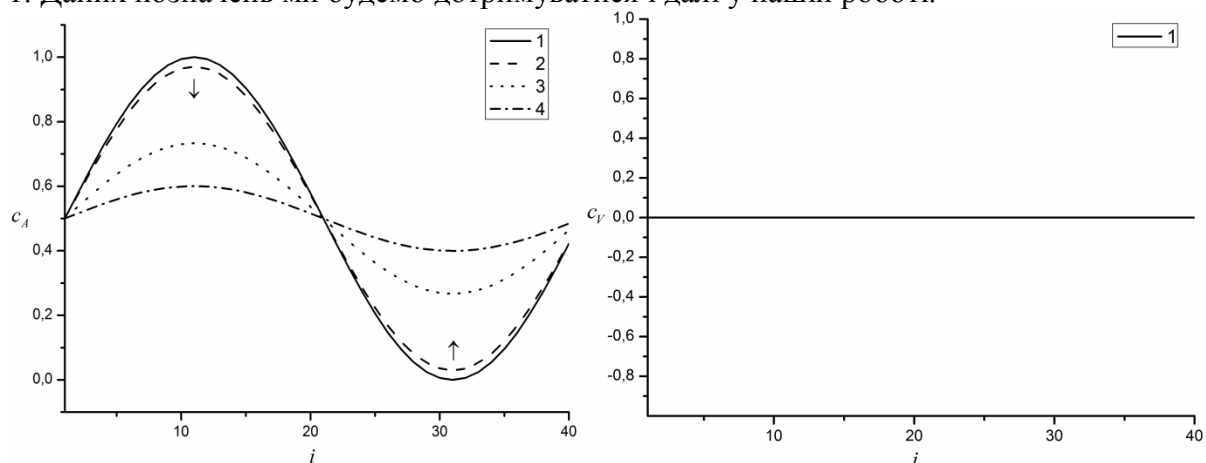


Рис. 1. Еволюція концентраційних профілів компонента c_A (ліворуч) та вакансій c_V (праворуч) від координати

Експеримент №2: $V_{AA} = V_{BB} = V_{AB} = -0.09 \text{ eV}$; $v_{0A} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$; $v_{0B} = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$.

У даному експерименті ми вибрали різні частотні множники при збереженні ідеальності розчину, щоб дослідити кінетичні фактори незалежно від термодинамічних. Бачимо, що при цьому концентрація вакансій починає змінюватися, утворюючи синусоїдальний розподіл у просторі, амплітуда якого змінюється з часом немонотонно (наростає, а потім спадає до нуля). Відзначимо, що з початком перерозподілу концентрація вакансій стає більшою в тій частині зразка, де знаходиться рухливіший компонент В (рис.2).

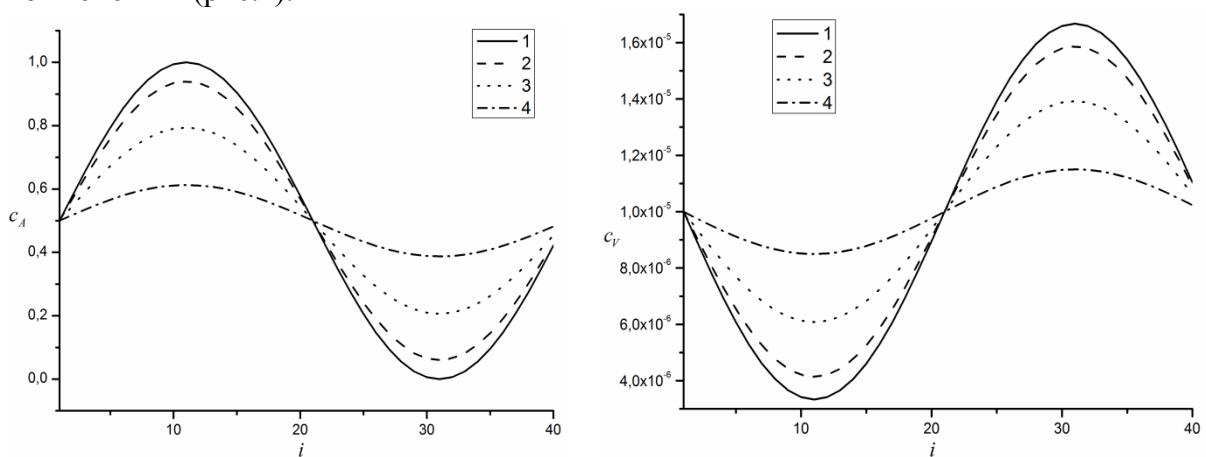


Рис. 2. Еволюція концентраційних профілів компонента c_A (ліворуч) та вакансій c_V (праворуч) від координати

Експеримент №3: $V_{AA} = V_{BB} = -0.05 \text{ eV}$; $V_{AB} = -0.09 \text{ eV}$; $v_{0A} = v_{0B} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$.

У випадку, коли енергія змішування не дорівнює нулю, а частотні множники є однаковими, ми отримали досить цікавий результат: концентраційний профіль компонента А та В на початкових стадіях подібний до попередніх випадків, проте, починаючи із певного моменту, ми спостерігаємо досить швидке утворення упорядкованої фази АВ. Профіль концентрації вакансій теж досить цікавий: на

початкових стадіях ми бачимо утворення двох максимумів, амплітуда яких з часом зменшується.

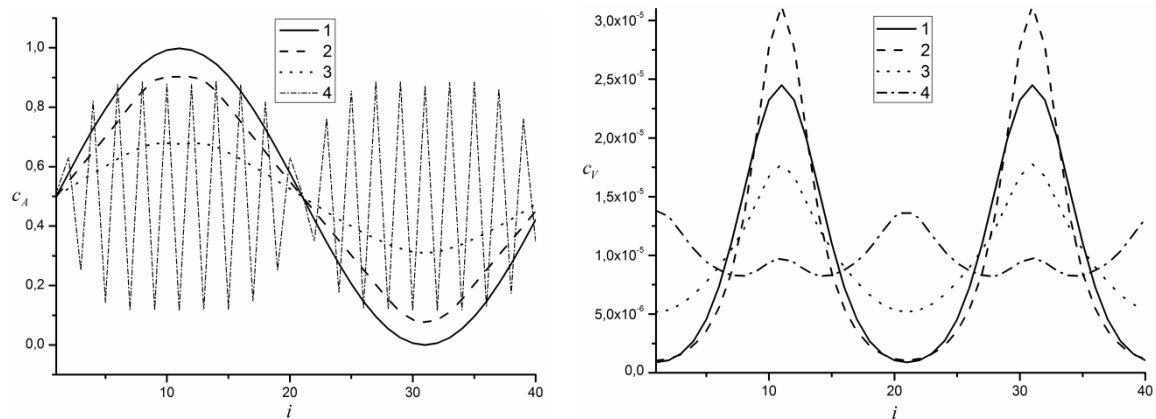


Рис. 3. Еволюція концентраційних профілів компонента c_A (ліворуч) та вакансій c_V (праворуч) від координати

Експеримент №4:

$$V_{AA} = V_{BB} = -0.05 \text{ eV}; V_{AB} = -0.09 \text{ eV}; v_{0A} = 10^{13} \text{ c}^{-1}; v_{0B} = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}.$$

Порівнюючи дані результати із попереднім експериментом, можна помітити, що кінцеві розподіли концентрації вакансій ідентичні. Різниця спостерігається тільки на початкових стадіях взаємної дифузії, коли вакансії, в основному, зосереджуються в області рухливішого компонента В. Як і в Експерименті № 3, ми спостерігаємо утворення упорядкованої фази АВ.

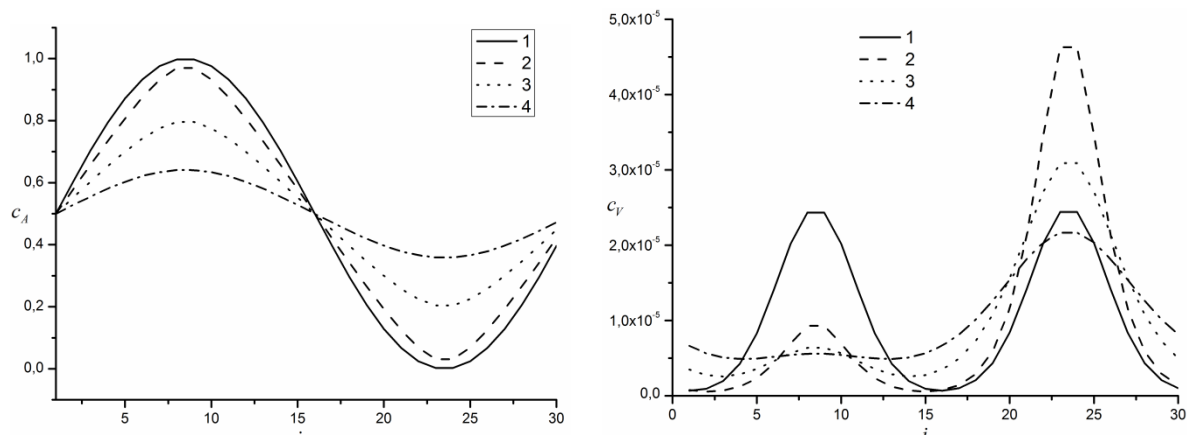


Рис. 4. Еволюція концентраційних профілів компонента c_A (ліворуч) та вакансій c_V (праворуч) від координати

Експеримент №5:

$$V_{AA} = -0.05 \text{ eV}; V_{BB} = -0.03 \text{ eV}; V_{AB} = -0.09 \text{ eV}; v_{0A} = 10^{13} \text{ c}^{-1}; v_{0B} = 10^{13} \text{ c}^{-1}.$$

У даному експерименті, у кінці моделювання, ми отримали такий же результат, як і в Експериментах № 3 та № 4 з утворенням впорядкованої фази АВ. Концентраційний розподіл вакансій на ранніх стадіях має два різкі максимуми, амплітуда яких спадає з боку тугоплавкого компонента А та зростає з боку легкоплавкого компонента В. За час експерименту, у порівнянні із попередніми випадками, висота максимумів та мінімумів у розподілі вакансій не співпадає. Це може бути викликано тим, що компонент А є тугоплавким у порівнянні із В ($|V_{AA}| > |V_{BB}|$). Відповідно, системі вигідніше розмістити

вакансії на боці компонента В. Концентраційний профіль компонента А з часом стає вужчим (але ще зберігається майже чистий А), в той час як на боці компонента В (який уже практично вичерпаний) починають виникати флуктуації концентрації, які призводять до утворення впорядкованої фази на боці легкоплавкого компонента.

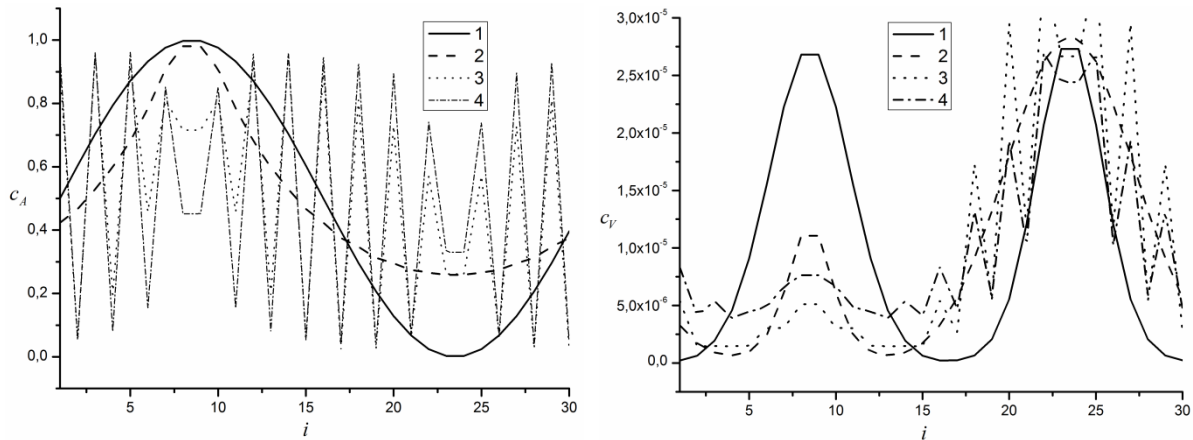


Рис. 5. Еволюція концентраційних профілів компонента c_A (ліворуч) та вакансій c_V (праворуч) від координати

Експеримент №6:

$$V_{AA} = -0.05 \text{ eV}; V_{BB} = -0.03 \text{ eV}; V_{AB} = -0.09 \text{ eV}; v_{0A} = 10^{13} \text{ c}^{-1}; v_{0B} = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1};$$

У порівнянні із попереднім випадком, ми бачимо, що збільшення рухливості менш тугоплавкого компонента В призводить до майже повного розчинення вакансій на боці компонента В. На боці компонента А у кінці обчислень ми спостерігаємо падіння концентрації вакансій майже у п'ять разів (пунктирна лінія на Рис. 6).

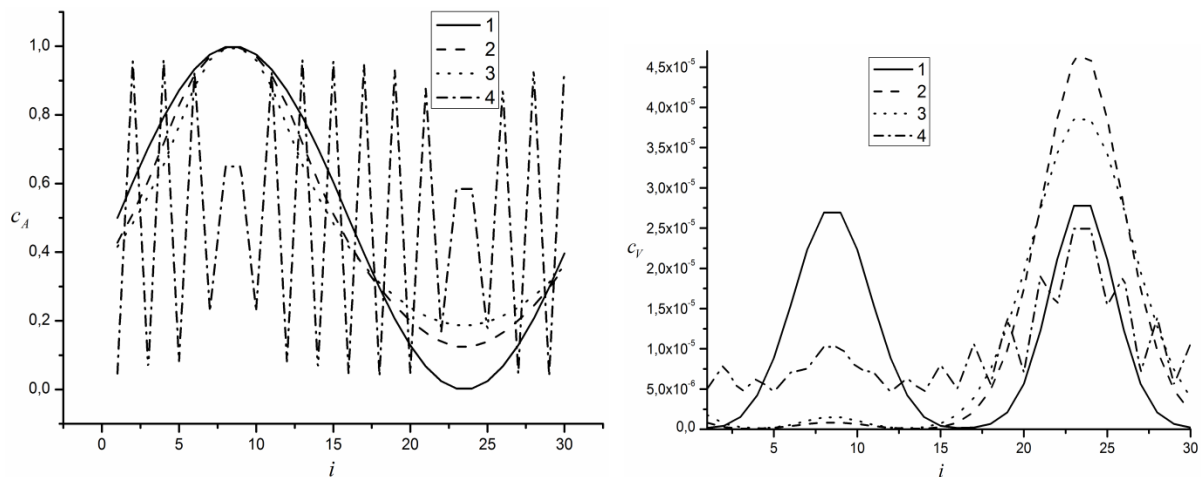


Рис. 6. Еволюція концентраційних профілів компонента c_A (ліворуч) та вакансій c_V (праворуч) від координати

Розвинутий нами метод було застосовано в модельному експерименті для перевірки відомої теорії Назарова-Гурова про роль нерівноважних вакансій у процесі взаємної дифузії [9]. При цьому ми повернулися до термодинамічно симетричного випадку. На Рис. 7 представлена залежність коефіцієнтів нахилу k кривих від $\frac{V_A V_B}{V_A + V_B}$. Коефіцієнт k являє собою кут нахилу кривої логарифма амплітуди концентрації

компонента А від часу при відповідних частотах ν_A та ν_B . Було проведено п'ять незалежних експериментів при постійному $\nu_{0A} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$ та зміні ν_{0B} від 10^{13} до $0.0625 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ (для кожного нового експерименту ми ділили ν_{0B} на два). Ми отримали п'ять різних констант (по модулю), які відклали на осі ординат, а по вісі абсцис – відповідну комбінацію частот. Можна помітити, що при зменшенні частоти компонента В відбувається зменшення швидкості зміни логарифма амплітуди компонента А. Це говорить про те, що дифузійний процес контролює повільніший компонент В. Комбінація частот $\frac{\nu_A \nu_B}{\nu_A + \nu_B}$ є аналогом коефіцієнта дифузії Назарова-Гурова:

$$D_{NG} = \frac{D_A^* D_B^*}{c_A D_A^* + c_B D_B^*}.$$

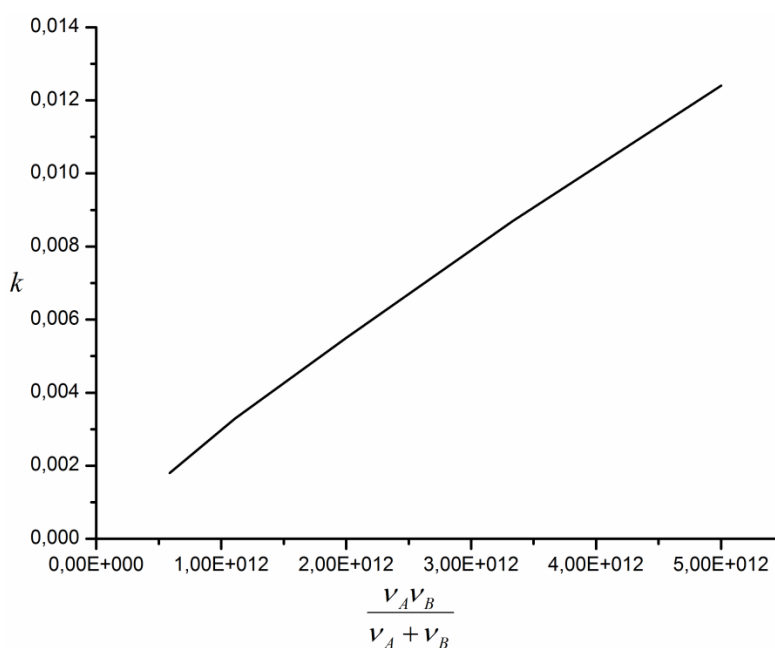


Рис. 7 Залежність кутів нахилу кривих логарифма амплітуди концентрації компонента А від співвідношення частот ν_A та ν_B

Висновки

У роботі ми провели серію експериментів, використовуючи середньопольовий кінетичний метод із врахуванням вакансій у системі. Перші два експерименти були проведені для перевірки валідності моделі. Результати виявилися очікуваними: при нульовій асиметрії системи ($|V_{AA}| = |V_{BB}|$) а при рівній нулю енергії змішування ми отримали повністю дзеркальний перерозподіл компонентів А та В з часом. Вакансійний концентраційний профіль не змінювався з часом та залишався паралельним осі абсцис (Експеримент № 1).

При збільшенні рухливості компонента В у п'ять разів спостерігається синусоїдальний перерозподіл вакансій. У цьому випадку концентрація вакансій була більша в області рухливішого компонента (Експеримент № 2).

У випадку, коли енергія змішування не дорівнює нулю, спостерігалось утворення впорядкованої фази АВ. Вакансійний концентраційний профіль мав два максимуми, які з часом симетрично зменшували свою амплітуду у випадку однакових частотних

множників $v_{0A} = v_{0B} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$, і несиметрично при різних частотних множниках (Експерименти № 3 та № 4).

В інших двох експериментах (Експерименти № 5 і № 6) при введенні асиметрії у систему компонент А був більш тугоплавким, ніж компонент В. Спостерігається утворення фази АВ, але вакансійний перерозподіл відрізняється від результатів, отриманих у Експериментах № 3 і № 4. Відбувається накопичення вакансій в області менш тугоплавкого компонента В, які з часом не перерозподіляються подібно до двох вищезгаданих експериментів. При збільшенні рухливості компонента В ми, як і очікувалося, спостерігаємо додаткове вичерпання вакансій на боці тугоплавкого компонента А.

Встановлено лінійну залежність між константою швидкості зміни амплітуди концентрації компонента А від коефіцієнта дифузії Назарова-Гурова. Даний результат свідчить про те, що дифузійним процесом керує повільніший компонент.

В подальшому, середньопольовий кінетичний метод із урахуванням вакансій у системі буде використовуватися для вивчення та аналізу конкуренції фаз у різних системах.

Подяки

Робота була підтримана європейською програмою FP7-PEOPLE-2013-IRSES (грантова угода: PIRSES-GA-2013-612552), а також, частково, грантом МОН України.

Список використаної літератури

1. Martin G. Atomic mobility in Cahn's diffusion model. / G. Martin // *Physical Review B* – 1990. - Vol. 41, №4. – P. 2279–2283.
2. Beke D. L. Nanoscale Effects in Diffusion. / D. L. Beke, Z. Erdélyi, I.A. Szabó, C. Cserháti // *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* – 2004. – Vol. 19. – P. 107–128.
3. Beke D. L. Diffusion under large driving forces. / D. L. Beke, Z. Erdélyi // *Defect and Diffusion Forum* – 2006. – Vol. 249. – P. 119–126.
4. Beke D. L. Growth Kinetics on Nanoscale: Finite Diffusion Permeability of Interfaces. / D. L. Beke, Z. Erdélyi // *Defect and Diffusion Forum* – 2007. – Vol. 266. – P. 1 – 12.
5. Storozhuk N.V. Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion / N.V. Storozhuk, K.V. Sopiga and A.M. Gusak // *Philosophical Magazine* – 2012. – Vol. 93, №16. – P. 1999–2012.
6. Сопіга К. В. Середньопольові моделі дифузії і впорядкування у сплавах: магістерська робота, спеціальність 8.04020301 - фізика / Сопіга Костянтин Володимирович – Черкаси, 2014. – 55 с.
7. Gusak A. M. Diffusion-controlled Solid State Reactions: In Alloys, Thin Films and Nanosystems / Andriy M. Gusak, T. V. Zaporozhets, Yu. O. Lyashenko, S.V. Kornienko, M. O. Pasichnyu, A. S. Shirinyan // WILEY-VCH, 2010, – 476 p.
8. Гуров К.П. / К.П. Гуров, А.М. Гусак // *Физика металлов и металловедение* – 1985. – Т. 59. – С. 1062.
9. Назаров А.В. / А.В. Назаров и К.П. Гуров // *Физика металлов и металловедение* – 1974. – Т. 37. – С. 496.
10. Климонтович Ю. Л. Статистическая физика. / Ю. Л. Климонтович М.: Наука, 1982, 608 с.

References

1. Martin G. (1990). Atomic mobility in Cahn's diffusion model. *Physical Review B*, 41(4), 2279-2283.
2. Beke D. L., Erdélyi Z. Erdélyi, Szabó I.A. Szabó, Cserháti C. (2004). *Nanoscale Effects in Diffusion. Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*, 19, 107-128.
3. Beke D. L., Erdélyi Z. (2006). Diffusion under large driving forces. *Defect and Diffusion Forum*, 249, 119-126.
4. Beke D. L., Erdélyi Z. (2007). Growth Kinetics on Nanoscale: Finite Diffusion Permeability of Interfaces. *Defect and Diffusion Forum*, 266, 1-12.
5. Storozhuk N.V., Sopiga K.V. and Gusak A.M. (2012). Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion. *Philosophical Magazine*, 93 (16), 1999-2012.
6. Sopiha K.V. (2014). *Mean field diffusion models and ordering in alloys*. (Master thesis, Cherkasy national university named after B. Chmelnytsky, Cherkasy, Ukraine).
7. Gusak A. M., Zaporozhets T. V., Lyashenko Yu. O., Kornienko S.V., Pasichnyy M. O., Shirinyan A. S. (2010). *Diffusion-controlled Solid State Reactions: In Alloys, Thin Films and Nanosystems*. WILEY-VCH.
8. Gurov K. P. Gusak A. M. (1985). *Physics of Metals and Metallography*, 59, 1062.
9. Nazarov A.V. and Gurov K. P. (1974). *Physics of Metals and Metallography*, 37, 496.
10. Klimontovich Yu. L. (1982). *Statistical physics*. Moscow: Nauka. (in Rus.)

Summary. *O. M. Rymar. Role of nonequilibrium vacancies at interdiffusion in a crystal without sinks.* For the first time the results of interdiffusion simulation in fcc structure between pure components A and B by the kinetic mean-field method are presented. Nonequilibrium vacancies redistribution is taken into account in the system. Initial distribution of the components with average concentration 0.5 is chosen to be sinusoidal. Initial vacancy concentration is chosen to be constant. From the beginning, we have a concentration gradient of A and B. Concentration profiles evolution at various combinations of pair interaction energies is studied. In case of equal frequency factors of the components, the vacancy concentration remains constant everywhere. If frequency factors are not the same, the distribution of vacancies becomes sinusoidal. At the same time, vacancies start to accumulate on the side of material with lower melting point. In the symmetric case (the same energy values of pairwise interactions A-A and B-B) there occurs the formation of an ordered phase AB. The formation of an ordered phase AB also has been observed after introduction of asymmetry to the system but with asymmetric nature of the redistribution of vacancies.

Keywords: Kinetic mean-field method, mutual diffusion, nonequilibrium vacancies, asymmetry.

Одержано редакцією 20.11.2015

Прийнято до друку 03.12.2015