

ORCID: 0000-0003-3119-2714

Ю. В. Чувтаєв

Магістрант, ННІ ІНФОТЕХ,

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
Черкаси, Україна.

ORCID: 0000-0001-8246-2679

С. В. Корнієнко

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент,

доцент кафедри фізики ННІ ІНФОТЕХ,

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,

Черкаси, Україна,

semen@phys.cdu.edu.ua

УДК 538.9

DOI: 10.31651/2076-5851-2019-1-96-106

PACS 05.70.Np, 61.72.Bb,

61.72.jd, 66.30.Dn, 66.30.Ny

МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОДІЛУ ПОР ЗА РОЗМІРАМИ В ДИФУЗІЙНІЙ ЗОНІ*

В роботі проведено моделювання розподілу пор за розмірами вздовж дифузійної зони під час процесу реакційної дифузії для бінарної системи. Вважається, що пори виникають з певною періодичністю біля міжфазної границі, де існує пересичення по вакансіям внаслідок різних рухливостей компонентів. Пори рухаються в об'ємі нової фази, що росте, змінюючись за розміром. Запропонована модель враховує вплив на пороутворення джерел/стоків нерівноважних вакансій двох видів, в залежності від місця їх знаходження: в об'ємі фази, та на міжфазних границях. Результати моделювання показують, що ефективність роботи джерел/стоків вакансій впливає не лише на швидкість росту фази і пор, але і на форму розподілу пор за розмірами та їх максимальний розмір. Крім того, кожен вид джерел/стоків нерівноважних вакансій по-різному впливає на кінетику пороутворення.

Ключові слова: пора, розподіл пор за розмірами, нерівноважні вакансії, реакційна дифузія, бінарна система.

1. Вступ

Проблема пороутворення є особливо актуальною для надійності люттевих з'єднань у мікроелектроніці [1-5]. Ріст інтерметалічних сполук між припоєм та металічним контактом інтегральної мікросхеми супроводжується появою пор, які спричиняють розрив електричного кола і призводять до відмов приладів електроніки. Однією з можливих причин пороутворення при вакансійному механізмі дифузії є виникнення в дифузійній зоні областей з пересичення і недосиченням вакансіями, обумовлене різною рухливістю компонентів. Ця відмінність призводить до появи результуючого

* Статтю написано згідно з держбюджетною темою “Сингулярні розв'язки рівнянь математичної фізики в анізотропних і неоднорідних середовищах, моделювання процесів дифузії та абсорбції” (№ 0119U100421)

вакансіного потоку у бік більш рухливого компонента. Для переходу до стану з рівноважною концентрацією вакансій дифузійна система буде позбавлятися надлишкових вакансій за допомогою вакансійних стоків, в якості яких можуть виступати: дислокації, міжфазні та міжзеренні границі, а також мікропори. Ефективність роботи джерел/стоків вакансій суттєво впливає також на кінетику росту фази, та морфологію дифузійної зони [6-10]. Поява і ріст пор при реакційній дифузії є одним із засобів релаксації вакансійної підсистеми [11,12].

Метою роботи є змодельовати пороутворення під час процесу реакційної дифузії у бінарній системі, і дослідити чисельними методами ріст пор, та їх розподіл за розмірами в дифузійній зоні. Створена модель процесу пороутворення, що розглядається в нашій роботі є продовженням і подальшим розвитком більш ранньої моделі для кінетики росту однієї пори [13].

2. Опис моделі

Розглядаємо пороутворення, що відбувається під час росту проміжної фази α в результаті реакційної дифузії у бінарній системі. Опис росту фази α , починаємо з моменту, коли вона вже має вигляд суцільного прошарку. В якості модельної системи беремо бінарну дифузійну пару, що складається з чистих, взаємно нерозчинних компонентів А і В. Дифузія відбувається за вакансійним механізмом. Припускаємо, що атоми сорту А мають більший власний коефіцієнт дифузії ніж атоми сорту В ($D_A > D_B$), тому результуючий потік речовини в системі відліку кристалічної ґратки буде направлений вздовж вісі ОХ, а результуючий потік вакансій – в протилежний бік (Рис. 1).

Вважатимемо, що джерела/стоки вакансій (К-стоки) діють не лише на границях фази α , але і в її об'ємі. За таких умов ріст товщини фази α описується наступним виразом [10]:

$$\frac{d(\Delta x)}{dt} = -\frac{\tilde{D}}{c_A c_B} \frac{\Delta c}{\Delta x} \left[\frac{\frac{D_{NG}}{\tilde{D}} \frac{\Delta x}{L_V} \left(\frac{1+e^{-\frac{\Delta x}{L_V}}}{1-e^{-\frac{\Delta x}{L_V}}} \right) + \frac{\delta \Delta x}{L_{Vb}^2}}{\frac{\frac{D_{NG}}{\tilde{D}} \frac{\Delta x}{L_V} \left(\frac{1+e^{-\frac{\Delta x}{L_V}}}{1-e^{-\frac{\Delta x}{L_V}}} \right) + \frac{\delta \Delta x}{L_{Vb}^2} + 2 \left(1 - \frac{D_{NG}}{\tilde{D}} \right)}} \right], \quad (1)$$

де c_A, c_B - відносна атомна концентрація компонентів А, В (середнє значення) у фазі α , відповідно; \tilde{D} - коефіцієнт взаємної дифузії по Даркену ($\tilde{D} = c_A D_B + c_B D_A$); D_{NG} - коефіцієнт дифузії Назарова-Гурова ($D_{NG} = \frac{D_A D_B}{c_A D_A + c_B D_B}$); D_A, D_B - власні коефіцієнти дифузії компонентів А і В у фазі α ; D_V - коефіцієнти дифузії вакансій у фазі α ; L_V - характерна довжина для вакансій у об'ємі фази α ($L_V^2 = (D_{NG} D_V \tau_{Vg}) / \tilde{D}$); L_{Vb} - характерна довжина для вакансій на міжфазних границях фази α ($L_{Vb}^2 = D_V \tau_{Vb}$); τ_{Vg} - час

релаксації вакансій у об'ємі фази α ; τ_{vb} - час релаксації вакансій на границі фази α ; δ - ширина границі; Δx - ширина фази α ; Δc - концентраційний інтервал гомогенності фази α по компоненту А.

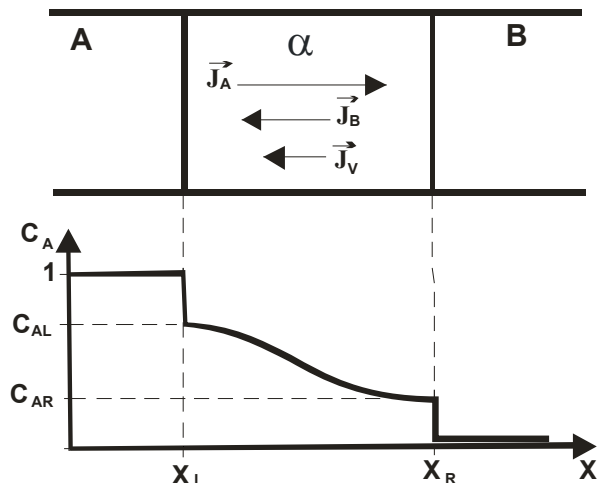


Рис. 1. На границі між А і В утворюється фаза α у вигляді суцільного прошарку. Концентраційний профіль компоненту А у фазі α .

Fig. 1. The phase α is formed as a continuous layer at the boundary between A and B. The concentration profile of component A in phase α .

Так як за нашою моделлю результуючий потік вакансій направлений у бік більш рухливого компоненту А, то у фазі α на міжфазній границі А | α виникне область, де існує пересичення по вакансіям, і тому в ній можливе утворення пор, які слугують додатковими стоками нерівноважних вакансій (F-стоки). При моделюванні процесу пороутворення в цю область фази α вводимо з певною періодичністю пори, слідкуючи за подальшою зміною їх розміру і положення у ході подальшого дифузійного росту фази α .

Основні наближення моделі пороутворення:

1. Пори мають сферичну форму.
2. Пори не взаємодіють між собою.
3. Наявність пор не змінює дифузійного потоку компонентів у дифузійній зоні.
4. Перша пора у системі з'являється, коли ширина фази досягне певного значення Δx_K .
5. Після появи, пора має початковий радіус R_0 і початкову координату x_0 . Координата пори у дифузійній зоні визначаємо відносно лівої гранці фази α (Рис.2).

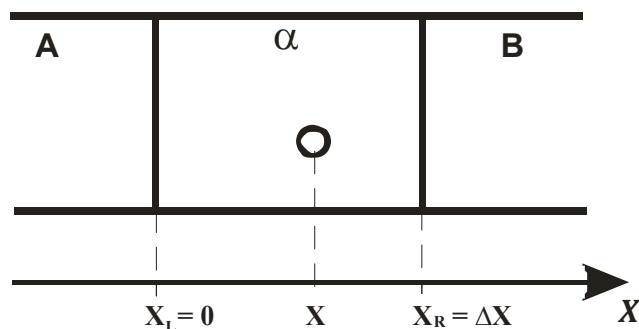


Рис. 2 Розташування пори у фазі α .
Fig. 2. The void location in the phase α .

6. Пору рухається всередині фази разом з кристалічною ґраткою в її околі. Швидкість її руху в лабораторній системі відліку буде рівна швидкості течії кристалічної ґратки – швидкості Кіркендала:

$$V_K = \Omega \cdot j_V, \quad (2)$$

де V_K – швидкість Кіркендала; j_V – потік вакансій в фазі α , Ω – об'єм, що припадає на один атом.

7. Швидкість зміни розміру пори розраховується за наступним співвідношенням [11]:

$$\frac{dR}{dt} = D_V \frac{(c_V - c_V^{eq})}{R} \quad (3)$$

де R – радіус пори, c_V – концентрація вакансій в точці середовища, де розташована пора; c_V^{eq} – рівноважна концентрація вакансій.

8. Нова пора у системі з'являється кожного разу, коли ширина фази збільшиться на певну фіксовану величину (Δh) відносно її значення на момент появи останньої пори. Розмір і положення у дифузійній зоні нової пори визначаються у відповідності до пунктів 5-7.

3. Результати комп'ютерного моделювання

Параметри системи, при яких проводились чисельні розрахунки: $D_V = 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$; $D_A = 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$; $D_B = 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$; $c_A = 0.7$; $c_B = 0.3$; $\Delta c = 0.01$; $R_0 = 10^{-9}$; $\Delta x_0 = 10^{-8} \text{ м}$, $\Delta x_K = 10^{-7} \text{ м}$; $\Delta h = 10^{-8} \text{ м}$ $x_0 = 10^{-10} \text{ м}$; $\tau_{Vg} = 10^{-3} \text{ с}$; $\tau_{Vb} = 10^{-3} \text{ с}$.

Пора, виникає у фазі α біля її лівої границі і з плином часу віддаляється від неї. Хоч пора рухається в той же бік, що і міжфазна границя біля якої вона виникла (якщо розглядати цей рух відносно лабораторної системи відліку), але границя рухається швидше, тому розмірі росту фази α пора опиняється все далі у глибині її об'єму. Радіус пори збільшується до тих пір поки вона знаходиться в тій частині дифузійної зони де існує пересичення по вакансіям, коли ж вона її залишає ріст припиняється. Якщо пора опиняється в області дифузійної зони, де пересичення по вакансіям стає від'ємним (концентрація вакансій менша за рівноважну), вона починає зменшуватись, поки не зникне. Оскільки в нашій моделі нові пори з'являються біля лівої міжфазної границі у фазі α з певною регулярністю, то в результаті отримуємо набір пор різного розміру розташованих вздовж дифузійної зони (Рис.3). Кожна точка на графіку показує розмір пори та її розташування. Пори розмір яких став меншим початкового значення R_0 вважаються такими, що зникли, хоч ми і продовжуємо слідкувати за їхнім рухом. На графіку таким зниклим порам відповідають точки з значенням розміру 0. З плином часу ширина фази α зростає, а отже збільшується кількість пор. Як можна бачити з Рис.3 форма розподілу пор за розмірами поступово еволюціонує, що пов'язано з зміною розподілу нерівноважних вакансій в дифузійній зоні Рис.4. Там де концентрація вакансій рівноважна або пересичення по вакансіям незначне, розкид пор за розмірами невеликий, в тих місцях де пересичення є достатньо значним, як з знаком "+", так і з знаком "-", пори суттєво відрізняються за розмірами.

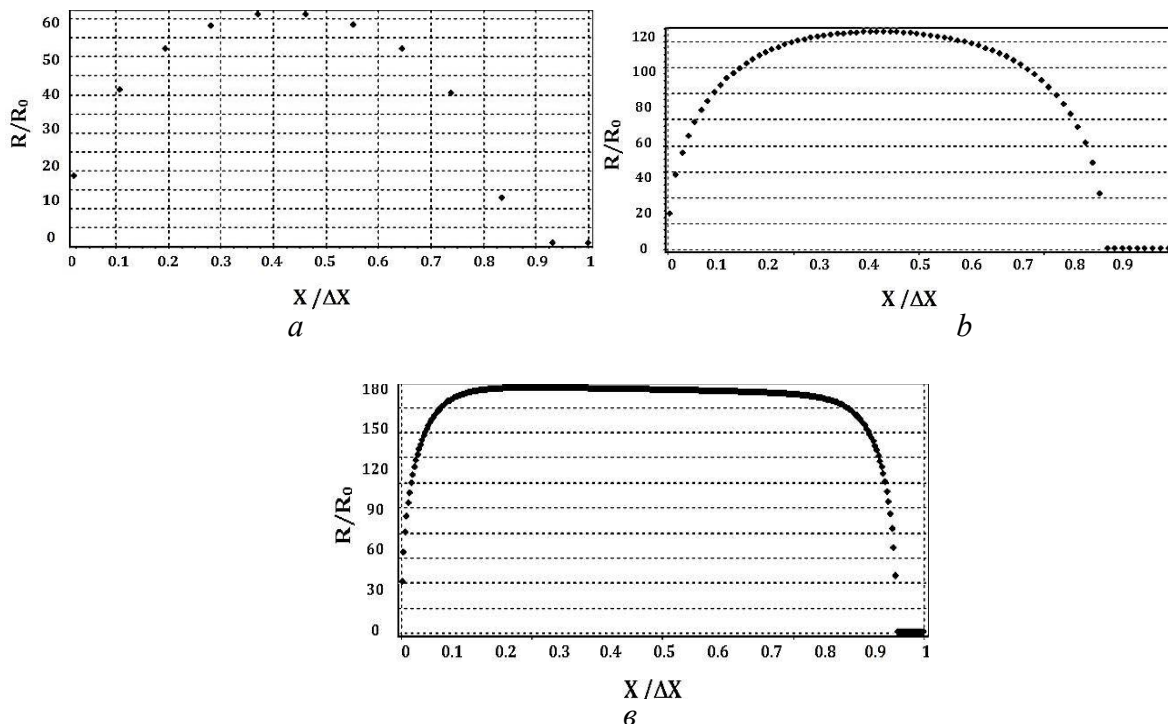


Рис. 3 Розподіл пор за розмірами у фазі α .
 а – $t=10^3$ с; б – $t=10^4$ с; в – $t=10^5$ с. (R- радіус пори, $R_0 = 10^{-9}$ м; X- координата пори; ΔX - ширина фази α ; t – час протягом якого розглядається ріст фази α).

Fig. 3. The void size distribution in the phase α . a – $t=10^3$ s; b – $t=10^4$ s; c – $t=10^5$ s. (R- void radius, $R_0 = 10^{-9}$ m; X- void coordinate; ΔX - width of the phase α ; t –time of phase α growth).

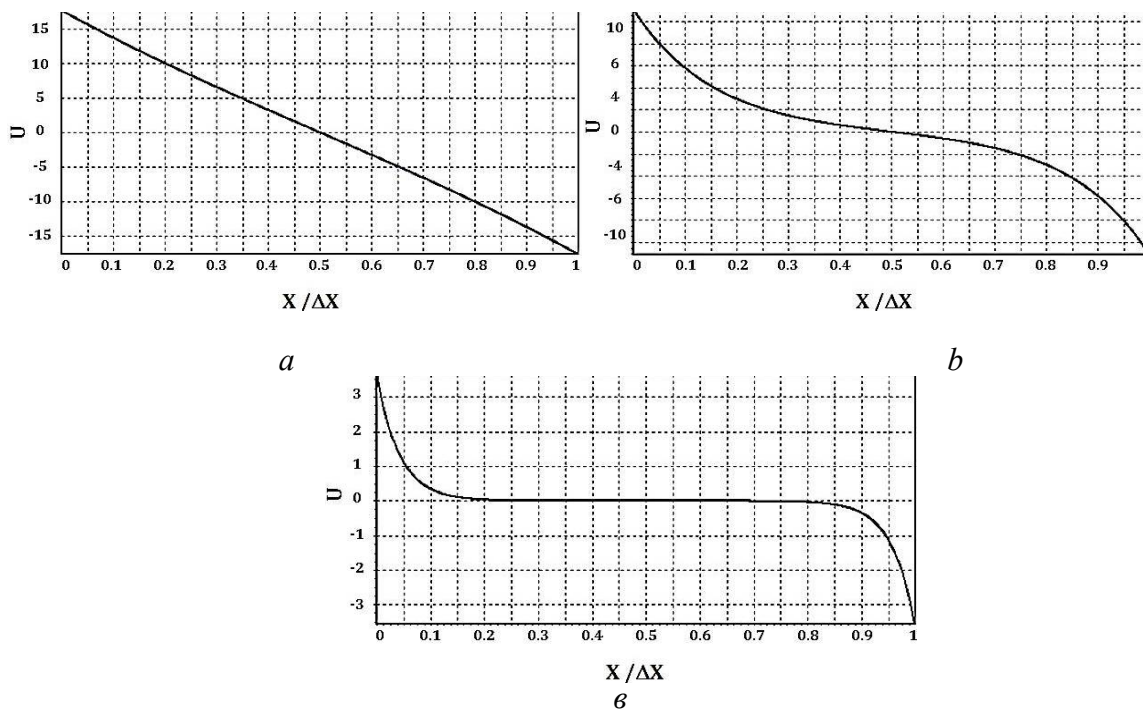
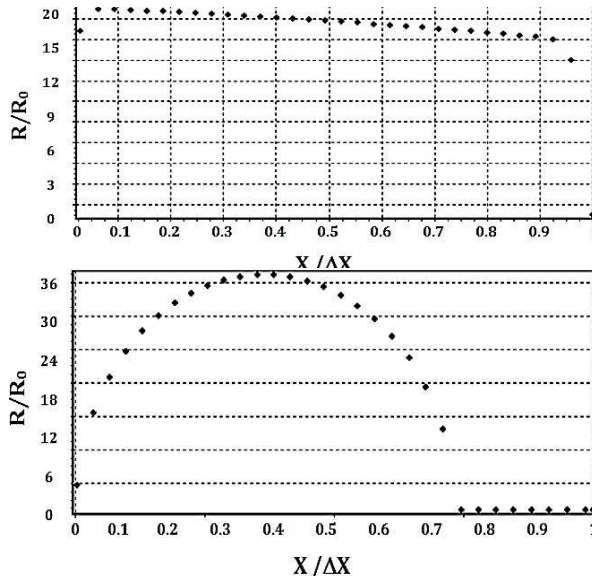


Рис. 4. Пересичення по вакансіям у фазі α .
 а – $t=10^3$ с; б – $t=10^4$ с; в – $t=10^5$ с.
 ($U = (c_V - c_V^{eq}) \cdot 10^8$ - пересичення по вакансіям; X- координата пори; ΔX - ширина фази α ; t – час протягом якого розглядається ріст фази α).

Fig. 4. The vacancy supersaturation in the phase α . a – $t=10^3$ s; b – $t=10^4$ s; c – $t=10^5$ s ($U = (c_V - c_V^{eq}) \cdot 10^8$ -vacancy supersaturation ; X- void coordinate; ΔX - width of the phase α ; t –time of phase α growth).



a b

Рис. 5 Розподіл пор за розмірами у фазі α .

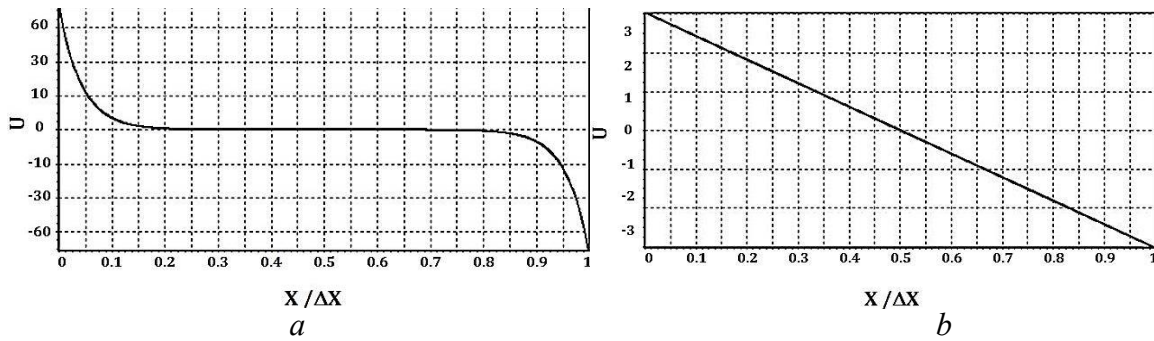
a) $\tau_{Vg}=10^{-6}$ c, $\tau_{Vb}=10^{-1}$ c, $t=10^3$ c; b) $\tau_{Vg}=10^{-1}$ c, $\tau_{Vb}=10^{-6}$ c, $t=10^3$ c.

(t – час протягом якого ведеться розгляд росту фазі α ; R- радіус пори; $R_0 = 10^{-9}$ м; X- координата пори; ΔX - ширина фазі α).

Fig. 5. The void size distribution in the phase α .

a) $\tau_{Vg}=10^{-6}$ s, $\tau_{Vb}=10^{-1}$ s, $t=10^3$ s; b) $\tau_{Vg}=10^{-1}$ s, $\tau_{Vb}=10^{-6}$ s, $t=10^3$ s.

(t –time of phase α growth; R- void radius; $R_0 = 10^{-9}$ m; X- void coordinate; ΔX - width of the phase α).



a b

Рис. 6. Пересичення по вакансіям у фазі α .

a) $\tau_{Vg}=10^{-6}$ c, $\tau_{Vb}=10^{-1}$ c; $t=10^3$ c; b) $\tau_{Vg}=10^{-1}$ c, $\tau_{Vb}=10^{-6}$ c, $t=10^3$ c.

(t – час протягом якого ведеться розгляд росту фазі α ; $U = (c_V - c_V^{eq}) \cdot 10^8$ - пересичення по вакансіям; X- координата пори; ΔX - ширина фазі α).

Fig. 6. The vacancy supersaturation in the phase α .

a) $\tau_{Vg}=10^{-6}$ s, $\tau_{Vb}=10^{-1}$ s, $t=10^3$ s; b) $\tau_{Vg}=10^{-1}$ s, $\tau_{Vb}=10^{-6}$ s, $t=10^3$ s.

(t –time of phase α growth; $U = (c_V - c_V^{eq}) \cdot 10^8$ - vacancy supersaturation ; X- void coordinate; ΔX - width of the phase α).

Розподіл в дифузійній зоні нерівноважних вакансій визначається ефективністю роботи їх джерел/стоків. В нашій моделі враховано існування джерел/стоків вакансії двох типів: ті що розташовані на границях фази α , та ті що діють в об'ємі фази α (дислокації та міжзеренні границі). Параметрами, які характеризують ефективність дії джерел/стоків вакансій, є часи їх релаксації τ_{vb} і τ_{vg} (чим меншим є їх значення, тим ефективніше діють відповідні джерела/стоки). На Рис.5 наведені розподіли пор за розмірами для випадків, коли значення τ_{vb} і τ_{vg} є різними. Вони відрізняються не тільки формою, але і місцем розташування та значення максимуму у цьому розподілі. Різним є і прересичення по вакансіям у дифузійній зоні (Рис.6). Для випадку потужно діючих джерел/стоків вакансій у об'ємі та слабо на міжфазних границях (Рис.5а, Рис.6а) пори існують майже у всій фазі. Пересичення по вакансіям існує лише біля міжфазних границі і лише біля них спостерігається суттєвий розкид пор за розмірами. Якщо ж ситуація з ефективністю дії джерел/стоків вакансій протилежна (Рис.5b, Рис.6b), спостерігаємо значний розкид пор за розмірами, так як вздовж всієї фази існує постійний градієнт пересичення по вакансіям. Крім того, біля правої границі фази існує область де пороутворення немає (пори відсутні). Шляхом чисельного моделювання за допомогою даної моделі було отримано залежить ширини зони пороутворення (область де існують пори) від величини параметра τ_{vg} Рис. 7. Чим ефективніше діють джерела/стоки вакансій у об'ємі, тим ширшою є зона пороутворення. Також проведено дослідження впливу τ_{vg} на величину максимального значення розміру пори у їх розподілі за розмірами Рис. 8. Ця залежність виявилась немонотонною. Можливо на максимальний розмір пори впливає також відношення τ_{vb}/τ_{vg} . Подальший аналіз пороутворення за допомогою описаної моделі буде продовжено для визначення впливу на цей процес інших дифузійних параметрів системи.

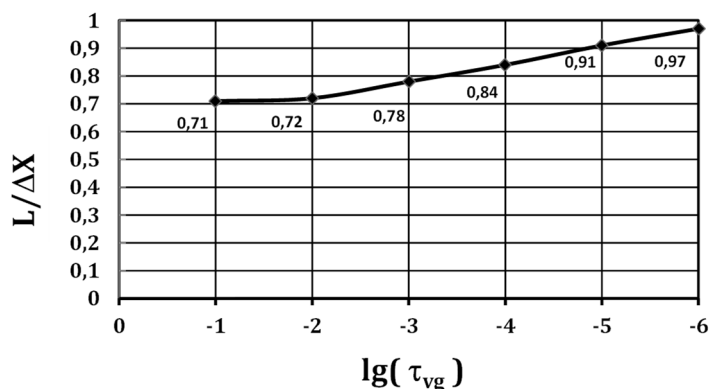


Рис.7. Залежність ширини зони пороутворення від часу релаксації вакансій у об'ємі фази α (τ_{vg})

(L- ширина зони пороутворення у фазі α ; ΔX - ширина фази α ; $\tau_{vb} = 10^{-6}$ с; $t = 10^3$ с).

Fig. 7. The dependence of the width of void formation zone on the vacancy relaxation time of the phase α volume (τ_{vg}).

(L- width of void formation zone in the phase α ; ΔX - width of the phase α ; $\tau_{vb} = 10^{-6}$ s; $t = 10^3$ s).

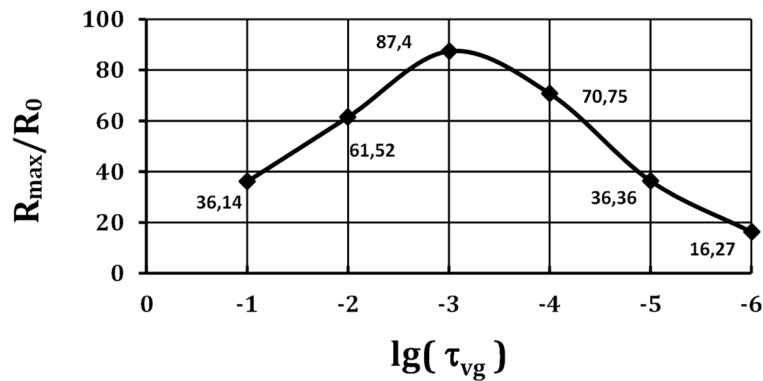


Рис. 8. Залежність максимального розміру пори від часу релаксації вакансій в об'ємі фази α (τ_{vg}). ($R_0 = 10^{-9}$ м, $\tau_{vb} = 10^{-6}$ с, $t = 10^3$ с).

Fig. 8. The dependence of the maximum void size on the vacancy relaxation time of the phase α volume (τ_{vg}). ($R_0 = 10^{-9}$ m, $\tau_{vb} = 10^{-6}$ s, $t = 10^3$ s).

4. Висновки

Результати комп'ютерного моделювання, на основі запропонованої моделі пороутворення, показують, що джерела/стоки вакансій є суттєвим чинником процесу утворення пор. Ефективність їх роботи визначає розподіл вакансій у системі, впливаючи на розподіл пор за розмірами та ширину зони де вони можуть існувати. Запропонована модель враховує вплив на пороутворення джерел/стоків нерівноважних вакансій двох видів, в залежності від місця їх знаходження: в об'ємі фази, та на міжфазних границях. Кожен вид джерел/стоків нерівноважних вакансій порізно впливає на кінетику пороутворення. Так, чим ефективніше працюють джерел/стоки нерівноважних вакансій у об'ємі фази тим ширшою є зона пороутворення (область де існують пори), та меншим розкид пор за розмірами у відповідному розподілі.

Список використаної літератури:

1. Tu K. N. Recent advances on electromigration in very-large-scale-integration of interconnects / K. N. Tu // Journal of Applied Physics. – 2003. – Vol. 94. – P. 5451 – 5473. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1611263>
2. Gan H. Polarity effect of electromigration on kinetics of intermetallic compound formation in Pb-free solder V-groove samples / H. Gan, K. N. Tu // Journal of Applied Physics. – 2005. – Vol. 97. – P. 063514. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1861151>
3. Huang M. Stress relaxation and failure of Cu-3.0Ag-0.5Cu flip-chip solder bumps undergoing electromigration / M. Huang, Zh. Zhang, S. Zhou, L. Chen // J.Mater.Res. – 2014. – Vol.29, №.21. – P. 2556-2564. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1557/jmr.2014.231>
4. An R. Electromigration-induced intermetallic growth and voids formation in symmetrical Cu/Sn/Cu and Cu/Intermetallic compounds (IMCs)/Cu joints/ R. An, Y. Tian, R. Zhang, C. Wang // J Mater Sci:Mater.Electron – 2015. – Vol.26. – P. 2674 - 2681. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1007/s10854-015-2736-6>
5. Hsu Hs.-L. Chen Impurity evaporation and void formation in Sn/Cu solder joints / Hs.-L. Hsu, Hs. Lee, Ch.-W. Wang, Ch. Liang, Ch.-M. Chen // Materials Chemistry and Physics. – 2019. – Vol. 225. – P. 153-158. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2018.12.036>

6. Гуров К. П. Описание взаимной диффузии в сплавах с произвольной мощностью стоков вакансий / К. П. Гуров, А. М. Гусак // Физика металлов и металловедение. – 1985. – Т.59, №6. – С.1062-1066.
7. Гусак А. М. Линейный рост фаз и неравновесные вакансии / А. М. Гусак // Металлофизика (НАНУ). – 1992. – Т.14, № 9. – С.3-6.
8. Корнієнко С. В. Вплив джерел та стоків вакансій у материнській фазі на кінетику реакційної дифузії у бінарній системі. / С. В. Корнієнко // Вісник Черкаського університету, серія фізико – математичні науки. – 2010. – № 185. – С.39 - 47.
9. Корниенко С. В. Модель реакционной диффузии в бинарной системе, учитывающая действие источников и стоков вакансий в материнских фазах. / С. В. Корниенко // Металлофизика и новейшие технологии. – 2013. – Т.35, №12. – С.1685-1696. – Режим доступа: http://irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?C21COM=2&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&IMAGE_FILE_DOWNLOAD=1&Image_file_name=PDF/MPhNT_2013_35_12_11.pdf
10. Корниенко С. В. Влияние источников и стоков вакансий на кинетику реакционной диффузии в бинарной системе. / С. В. Корниенко, А. М. Гусак // Металлофизика и новейшие технологии. – 2015. – Т.37, №10, – С.1001-1016. – Режим доступа: http://irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?C21COM=2&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&IMAGE_FILE_DOWNLOAD=1&Image_file_name=PDF/MPhNT_2015_37_10_3.pdf
11. Сторожук Н. В. Конкуренция эффектов Киркендалла и Френкеля при взаимной диффузии / Н. В. Сторожук, А. М. Гусак // Металлофизика и новейшие технологии. – 2014. – Т. 36, № 3. – С. 367-374. – Режим доступа: http://irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?C21COM=2&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&IMAGE_FILE_DOWNLOAD=1&Image_file_name=PDF/MPhNT_2014_36_3_8.pdf
12. Zaporozhets T. V. Competition of Voiding and Kirkendall Shift during Compound Growth in Reactive Diffusion–Alternative Models / T. V. Zaporozhets, N. V. Storozhuk, A. M. Gusak // Металлофизика и новейшие технологии. — 2016. – Т. 38, № 10. — С. 1279-1292. – Режим доступа: <https://doi.org/10.15407/mfint.38.10.1279>
13. Колісник Л. І. Моделювання росту пор при реакційній дифузії у бінарній системі. / Л. І. Колісник, С. В. Корнієнко // Вісник Черкаського університету, серія фізико – математичні науки. – 2018. – № 185. – С.39 – 47. Режим доступа: <http://phys-journal.cdu.edu.ua/article/view/3344/3720>

References:

1. Tu K. N. (2003). Recent advances on electromigration in very-large-scale-integration of interconnects. *Journal of applied physics*, 94(9), 5451-5473. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.1611263>
2. Gan H., Tu K. N. (2005). Polarity effect of electromigration on kinetics of intermetallic compound formation in Pb-free solder V-groove samples. *Journal of applied physics*, 97(6), 063514. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.1861151>
3. Huang M., Zhang Z., Zhou S., Chen L. (2014). Stress relaxation and failure behavior of Sn–3.0 Ag–0.5 Cu flip-chip solder bumps undergoing electromigration. *Journal of Materials Research*, 29(21), 2556-2564. Retrieved from <https://doi.org/10.1557/jmr.2014.231>
4. An R., Tian Y., Zhang R., Wang C. (2015). Electromigration-induced intermetallic growth and voids formation in symmetrical Cu/Sn/Cu and Cu/Intermetallic compounds (IMCs)/Cu joints. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 26(5), 2674-2681.: Retrieved from <https://doi.org/10.1007/s10854-015-2736-6>

5. Hsu H. L., Lee H., Wang C. W., Liang C., Chen C. M. (2019). Impurity evaporation and void formation in Sn/Cu solder joints. *Materials Chemistry and Physics*, 225, 153-158. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2018.12.036>
6. Hurov K. P., Husak A. M. (1985) Gurov, K.P., & Gusak, A.M. (1985). *Description of mutual diffusion in alloys with an arbitrary power of vacancy sinks*. *Fyzyka metallov y metallovedenye*, 59(6), 1062-1066 (in Russ.)
7. Husak A. M. (1992) *Linear phase growth and nonequilibrium vacancies*. *Metallofyzyka (NANU)*, 14(9), 3-6 (in Russ.)
8. Korniienko S. V. (2010) Influence of sources and vacancies at maternal phases on the kinetics of dysfunction reaction in binary systems *Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriiia «Fizyko-Matematychni Nauky» (Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics")*, (185), 39-47 (in Russ.)
9. Korniyenko S. V. (2013) *A model of reaction diffusion in a binary system that takes into account the action of sources and drains of vacancies in maternal phases*. *Metallofyzyka y noveishye tekhnolohy*, 35(12), 1685-1696 (in Russ.) Retrieved from http://irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?C21COM=2&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&IMAGE_FILE_DOWNLOAD=1&Image_file_name=PDF/MPhNT_2013_35_12_11.pdf
10. Korniyenko S. V., Husak A. M. (2015) *The influence of sources and sinks of vacancies on the kinetics of reaction diffusion in a binary system*. *Metallofyzyka y noveishye tekhnolohy*, 37(10), 1001-1016 (in Russ.) Retrieved from http://irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?C21COM=2&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&IMAGE_FILE_DOWNLOAD=1&Image_file_name=PDF/MPhNT_2015_37_10_3.pdf
11. Storozhuk N. V., Husak A. M. (2014) *Competition of the Frenkel and Kirkendall effects in mutual diffusion*. *Metallofyzyka y noveishye tekhnolohyy*, 36(3), 367-374. (in Russ.) Retrieved from http://irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?C21COM=2&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&IMAGE_FILE_DOWNLOAD=1&Image_file_name=PDF/MPhNT_2014_36_3_8.pdf
12. Zaporozhets T. V., Storozhuk N. V., Gusak A. M. (2016) Competition of Voiding and Kirkendall Shift during Compound Growth in Reactive Diffusion–Alternative Models. *Metallofyzyka y noveishye tekhnolohyy*, 38(10), 1279-1292. Retrieved from <https://doi.org/10.15407/mfint.38.10.1279>
13. Kolisnyk L. I., Korniienko S. V. (2018) Modeling pore growth in reaction diffusion in a binary system. *Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriiia «Fizyko-Matematychni Nauky» (Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics")*, (185), 39-47. Retrieved from <http://phys-ejournal.cdu.edu.ua/article/view/3344/3720>

Yu.V. Chuvtaiev

Undergraduate student, Educational-Scientific Institute of Informational and Educational Technologies, The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine

S. V. Kornienko

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, associate professor of the Department of Physics of Educational-Scientific Institute of Informational and Educational Technologies, The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine
semen@phys.cdu.edu.ua

MODELING OF VOID DISTRIBUTION BY SIZE AT THE DIFFUSION ZONE

Summary. *At the interdiffusion and reaction diffusion which happens on the vacancy atomic diffusion mechanism, the inequality of atoms fluxes is caused by their differential mobility, give rise to a directional flux of vacancies. This flux of vacancies cause an appearance of areas in a diffusion zone with supersaturation and deficiency in vacancies, where sinks / sources of non-equilibrium vacancies act. The proposed model of void formation takes into account existence two types of sinks / sources of non-equilibrium vacancies, depending on their location: in the phase volume and at the interfacial boundaries. It is believed that the voids arise with a certain periodicity near the interfacial boundary, where there is a vacancy supersaturation due to the different mobility of the components. The voids move in volume of growing phase, their sizes change. The void radius increases as long as void is in the region of the diffusion zone where there is a vacancy supersaturation. The void radius begins to decrease if the void is in the area of the diffusion zone, where there is a negative vacancy supersaturation (the concentration of vacancies is less than the equilibrium) until it disappears. The simulation of void size distribution along the diffusion zone during the reaction diffusion process for a binary system is performed. The simulation results show that the work efficiency of vacancies sources/sinks affects not only the rate of void growth, but also the shape of the pore size distribution and their maximum size. In addition, each type of vacancies sources/sinks has a different effect on the kinetics of void formation. Thus, the more work efficiency of vacancies sources/sinks in the phase volume, the wider the void formation area (the area where the voids exist) and the smaller the difference between pore sizes.*

Keywords: void, void size distribution, non-equilibrium vacancies, reaction diffusion, binary system.

Одержано редакцією 06.09.2019

Прийнято до друку 12.10.2019