

Научная статья

## Некоторые сопряженные диффузионные задачи для трехкомпонентных систем

С.Е. Повернов<sup>1,2</sup>, А.Г. Князева<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Российская Федерация

<sup>2</sup> Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Российская Федерация

Диффузия играет важную роль при создании новых композитных материалов, так как она и сопутствующие ей явления участвуют в формировании так называемых переходных слоев. В работе анализируются варианты граничных условий в диффузионных задачах при неидеальном контакте между материалами. Разрыв в концентрациях возможен и при идеальном контакте, что обуславливается различием в подвижностях элементов в разных материалах. Неидеальный контакт приводит в граничных условиях к образованию особенностей, связанных с физическими факторами, а именно с диффузионным сопротивлением на границе. Показано, что в рамках теории термодинамики находит обоснование условие разрыва в концентрациях в виде экспоненциальной зависимости от температуры. Разработан алгоритм численного решения сопряженной диффузионной задачи, базирующийся на покомпонентном разделении уравнений диффузии и неявной разностной схеме второго порядка аппроксимации, что аналогично разделению по физическим процессам. Дискретные аналоги граничных условий также строятся со вторым порядком, поскольку в окрестности границы искомые величины представляются в виде разложений в ряд Тейлора по малым пространственным шагам, отличающимся в областях, состоящих из разных материалов. На решении задачи о перераспределении концентраций в двух сопряженных материалах проиллюстрирована сходимость алгоритма и непротиворечивость получаемых полей концентраций в разные моменты времени. Выбранные для иллюстраций параметры соответствуют термодинамическим ограничениям. Диффузионное сопротивление на границе раздела материалов оказывает влияние на распределение концентраций и скорость установления равновесного распределения. Перекрестные диффузионные коэффициенты не изменяют качественно влияние неидеального контакта на перераспределение концентраций. Подобные задачи и предложенный алгоритм могут быть полезными при моделировании синтеза композиционных материалов, а также в задачах сварки, пайки и нанесения покрытий.

*Ключевые слова:* многокомпонентная диффузия, неявная разностная схема, концентрации, неидеальный контакт

*Получение:* 01.11.2025 / *Публикация онлайн:* 25.02.2026

УДК 536.12 + 519.63

### 1. Введение

Композиционные материалы в последнее время все чаще используются при разработке современных технологий и конструкций. Важная роль в технологиях синтеза композитов принадлежит формированию переходных слоев между материалами, участвующими в процессе: между частицами и матрицей; между частицами одного и того же или разных материалов; между соединяемыми материалами и соединительным составом. При этом диффузия и сопутствующие ей явления являются основными стадиями [1–3]. Условия на контакте и динамика сопутствующих диффузии явлений в разных ситуациях различны. Диффузия определяет свойства неразъемных соединений, получаемых сваркой и пайкой [4, 5], свойства поверхностных слоев и покрытий [6–9], скорости химических реакций в твердых средах [10–13], механизмы формирования структуры материалов [13–15] и их механические и коррозионные свойства [16–18]. Особенности и роли диффузии в разных условиях посвящается огромное количество работ как теоретического, так и экспериментального характера. Однако до сих пор имеется ряд проблем, которые требуют более тщательного исследования. Среди них — проблема неидеального контакта между материалами; он может быть связан как со структурой контактирующих поверхностей, с особенностями взаимодействия поверхности неоднородного тела с жидкостью, так и с явлениями смачиваемости и ограниченной растворимости. Заметим, что смачиваемость присуща и твердым телам [19]. В любом случае при теоретическом изучении формирования диффузионных зон при контакте двух материалов приходим к сопряженным задачам, формулировка и решение которых оказываются нетривиальными.

### 2. Общие соотношения

Прежде чем переходить к частной задаче, вспомним некоторые понятия [3, 20–23].

По определению, диффузия — это процесс перемещения (перераспределения) вещества из области с высокой концентрацией в область с низкой концентрацией, приводящий к выравниванию концентраций. Это соответствует закону Фика, который для диффузии компонента  $B$  в среде  $A$  выглядит так:

$$\mathbf{J}_B = -D_B \nabla C_B, \quad (1)$$

где  $\mathbf{J}_B$  — плотность потока компонента,  $\nabla$  — оператор градиента,  $C_B$  — концентрация компонента  $B$  в среде  $A$ ,  $D_B$  — коэффициент диффузии компонента в этой среде, в общем случае зависящий от концентрации и температуры. Если речь идет о диффузии компонента в нем самом, то  $D_B$  — это коэффициент самодиффузии.

При диффузии двух веществ друг в друге говорят о взаимной диффузии, тогда  $D_B$  — коэффициент взаимной диффузии. В случае многокомпонентных веществ уравнение закона Фика принимает вид:

$$\mathbf{J}_k = - \sum_{i=1}^N D_{ki} \nabla C_i, \quad k=1,2,\dots,N, \quad (2)$$

где  $D_{ki}$  — парциальные диффузионные коэффициенты. Если  $C_i$  — относительные концентрации, то число независимых компонентов (концентраций) равно  $N - 1$ , так как  $\sum_{i=1}^N C_i = 1$  (что следует из определения относительных концентраций). Кроме этого, сумма всех диффузионных потоков равна нулю. Это уменьшает число степеней свободы, следует из определения диффузии как относительного движения (например, относительно центра масс в соответствующей системе отсчета) и непосредственно используется при выводе диффузионных уравнений и соотношений между коэффициентами в термодинамике необратимых процессов [22, 24, 25].

Например, в системе отсчета центра масс применяются относительные массовые концентрации:

$$C_k = \frac{\rho_k}{\rho}, \quad \rho = \sum_{k=1}^N \rho_k,$$

где  $\rho_k$  — парциальные плотности компонентов;  $\rho$  — плотность смеси. Скорость центра масс  $\mathbf{v}$  определяется следующим образом:

$$\rho \mathbf{v} = \sum_{k=1}^N \rho_k \mathbf{v}_k,$$

где  $\mathbf{v}_k$  — индивидуальные скорости  $k$ -го компонента смеси. Скорости диффузии  $\mathbf{w}_k$  и плотности диффузионных потоков  $\mathbf{J}_k = \rho_k \mathbf{w}_k$  по отношению к скорости центра масс есть

$$\mathbf{w}_k \equiv \mathbf{v}_k - \mathbf{v}, \quad k=1,2,\dots,N,$$

$$\mathbf{J}_k = \rho_k \mathbf{w}_k \equiv \rho_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) = \mathbf{J}_k^0 - \rho_k \mathbf{v}, \quad k=1,2,\dots,N,$$

так что индивидуальное движение  $k$ -го компонента смеси со скоростью  $\mathbf{v}_k$  состоит из двух частей: движения центра масс со скоростью  $\mathbf{v}$  и диффузии со скоростью  $\mathbf{w}_k$  относительно предыдущего движения. Из этого определения диффузионных потоков, которое имеет место для любых сред (твердых, жидких и газообразных), следует:

$$\sum_{k=1}^N \mathbf{J}_k \equiv 0.$$

Если закон (1) полностью подобен закону Фурье для теплопроводности, то обобщенный закон (2) не имеет аналогов в теории теплопроводности. Термодинамика обобщает эти законы [20–23]. В соответствии с термодинамикой необратимых процессов движущей силой диффузии в изотермических условиях служит химический потенциал, так что вместо (1) запишем:

$$\mathbf{J}_B = -L_B \nabla g_B,$$

а вместо (2) —

$$\mathbf{J}_k = - \sum_{i=1}^N L_{ki} \nabla g_i. \quad (3)$$

Здесь  $L_{ki}$  — феноменологические коэффициенты;  $g_i = g_i(T, C_k)$  — химические потенциалы компонентов, которые являются функциями температуры и состава, а их вид и входящие в них параметры определяются типом (структурой) веществ;  $L_{ki}$  — положительно определенная матрица феноменологических коэффициентов. Во многих ситуациях химические потенциалы можно представить в виде [21, 23]:

$$g_k = g_{k0} + RT m_k^{-1} \ln(C_k \gamma_k(C_l)), \quad (4)$$

где  $\gamma_k(C_l)$  — коэффициент активности (в общем случае функция концентраций,  $m_k$  — молярная масса компонента  $k$ ). Тогда

$$\nabla g_i = \sum_{j=1}^N \left( \frac{\partial g_i}{\partial C_j} \nabla C_j \right), \quad \frac{\partial g_i}{\partial C_j} = \frac{RT}{C_i m_i} g_{ij}, \quad (5)$$

где

$$g_{ij} = \delta_{ij} + \frac{C_i}{C_j} \frac{\partial \ln \gamma_i(C_j)}{\partial \ln C_j}$$

есть термодинамические множители. Их конкретный вид зависит от рассматриваемого приближения, принимаемого при описании структуры среды и механизма диффузии.

Учитывая (5) и баланс масс, из (3) получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_k &= -\sum_{i=1}^N L_{ki} \left[ \sum_{j=1}^N \left( \frac{\partial g_i}{\partial C_j} \nabla C_j \right) \right] = -\sum_{i=1}^N L_{ki} \left[ \sum_{j=1}^{N-1} \left( \frac{\partial g_i}{\partial C_j} \nabla C_j \right) - \frac{\partial g_i}{\partial C_N} \sum_{j=1}^{N-1} \nabla C_j \right] = \\ &= -\sum_{i=1}^N L_{ki} \left[ \sum_{j=1}^{N-1} \left( \left( \frac{\partial g_i}{\partial C_j} - \frac{\partial g_i}{\partial C_N} \right) \nabla C_j \right) \right] = -\sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^N L_{ki} \left( \frac{\partial g_i}{\partial C_j} - \frac{\partial g_i}{\partial C_N} \right) \nabla C_j. \end{aligned} \quad (6)$$

Сравнивая последнее выражение с (2), найдем:

$$D_{kj} = \sum_{i=1}^N L_{ki} \left( \frac{\partial g_i}{\partial C_j} - \frac{\partial g_i}{\partial C_N} \right) = \sum_{i=1}^N L_{ki} \frac{RT}{C_i m_i} (g_{ij} - g_{iN}) = D_{kj}(C_i).$$

Принимая во внимание баланс потоков, уравнение (6) еще подвергаем преобразованиям. В итоге найдем дополнительные ограничения на коэффициенты  $L_{ki}$ . Задавая вид потенциалов, приходим к разным зависимостям коэффициентов диффузии от состава.

В неизотермических условиях роль термодинамической силы, сопряженной диффузионному потоку, играет градиент химического потенциала, деленный на температуру. В этом случае, в соответствии с термодинамикой, в уравнения для потоков включается слагаемое, связанное с явлением термодиффузии

Более общие варианты диффузии в разных средах включают в рассмотрение и наличие иных полей — электрических, магнитных, механических, звуковых. Влияние напряжений и деформаций в термодинамических теориях диффузии [22, 24, 25] обнаруживается через химический потенциал, что к уравнениям для диффузионных потоков дает новые слагаемые [26–30], определяющие роль внешнего механического нагружения [31–34].

Аналитических и численных решений диффузионных задач в литературе имеется достаточно много, в том числе, применительно к процессам нанесения покрытий, поверхностной обработки, отжига, пайки и сварки, синтеза новых материалов и другому. Для решения диффузионных уравнений используются самые разные методы. Например, в статье [35] методом молекулярной динамики подтверждено формирование интерметаллида  $TiAl_3$  на границе раздела  $Ti-Al$  вследствие диффузии. Вполне очевиден факт ускорения атомной диффузии в системе  $Al-Mg$ , установленный в [36] также методом молекулярной динамики. Авторы выявили, что атомы  $Al$  легче диффундируют в решетку  $Mg$ , чем атомы  $Mg$  в решетку  $Al$ . В работе [37] представлена математическая модель диффузии водорода в металле с образованием и распадом неподвижных комплексов металл–примесь–водород с учетом вероятностей их образования и распада. Авторы статьи [38] разрабатывали алгоритмы численной реализации задач многокомпонентной диффузии, основанные на распараллеливании матричной прогонки. Самым популярным последние годы для моделирования диффузии и диффузионно-контролируемых процессов можно назвать, пожалуй, метод фазового поля [39], позволяющий наглядно иллюстрировать предполагаемые закономерности на мезоуровне. Например, в [40] изучается коррозионное растрескивание, обусловленное диффузией. В [41] предложена комбинированная модель фазового поля для мартенситного превращения с сопутствующей диффузией водорода. Статья [42] посвящена моделированию методом фазового поля диффузионно-контролируемых фазовых превращений в многокомпонентных системах с применением термодинамической базы данных CALPHAD и кинетической базы данных DICTRA. В [43] на основе варианта метода фазового поля исследуется эволюция дефектов, вызванная электромиграцией, индуцированной поверхностной диффузией. Методы, подобные [39, 44], не предполагают возможных разнообразных условий на границах раздела материалов, фаз или зерен, что является важным для объяснения формирования тех или иных особенностей диффузионных зон в реальных процессах [45].

Авторы [46] рассматриваются диффузионные задачи для трехкомпонентных систем в полубесконечных областях с постоянными коэффициентами диффузии. Это позволило авторам с помощью замены переменных разделить связанные уравнения и построить точные и приближенные решения. Однако граница раздела явно не выделялась. Решения некоторых простых задач взаимной диффузии представлены в [47], где сопряженные задачи также не обсуждаются.

Для многих приложений (в том, числе, проблем сварки, пайки и нанесения покрытий) важны сопряженные задачи, где границы раздела и условия на них выделяются явно. Так, в статьях [48, 49] представлены приближенные аналитические решения сопряженных диффузионных задач для полубесконечных сред и сред конечных размеров при наличии двух диффузантов. Идеальный контакт (неизменность химических потенциалов диффузантов (или даже их концентраций) при переходе через межфазную границу предполагается и в методе фазового поля [50, 51]).

В статье [52] представлен ряд сопряженных задач диффузии, для которых имеются аналитические решения. Наиболее часто для решения сопряженных задач используют операционный метод. Рассмотрена простейшая задача с граничным условием, отражающим плохую смачиваемость одного материала другим. Трехслойная сопряженная задача диффузии одного элемента с идеальными контактами и одинаковыми подвижностями в материалах решена в [53]. Подобное решение представлено в [54] при оценке механических напряжений в условиях

диффузионной пайки. В [55, 56] дано аналитическое решение трехслойной задачи. Сопряженная задача диффузии для единственного диффузанта в многослойном образце анализируется в [57]; все контакты считаются идеальными.

Несовершенные границы раздела определяют не только особенности тепловых полей и механических процессов в окрестности этих границ раздела [58–60], но и приводят к особенностям в диффузионно-контролируемых процессах [61, 62]. Многофазная, многокомпонентная модель фазового поля для изучения диффузионной сварки нержавеющей стали 316Н описана в [63]. Проведено исследование возможности управления процессом соединения слоев при изменении температуры, давления и шероховатости поверхностей с наблюдением за результирующей структурой зоны сварки. Применение такого подхода ограничено в связи с отсутствием многих кинетических и термодинамических данных и наличием в фазово-полевых моделях многочисленных подгоночных параметров и функций. Аналитические решения некоторых задач для простых (бинарных) систем с разными неидеальными условиями на границе раздела представлены в [64], где показано, что неидеальный контакт может приводить к задержке фазообразования.

В настоящей работе исследуются особенности перераспределения концентраций в окрестности границы раздела двух твердых недеформируемых материалов с перекрестными диффузионными потоками в изотермических условиях. Численный алгоритм основан на неявной конечно-разностной схеме, система линейных разностных уравнений на каждом временном шаге решается методом прогонки.

### 3. Постановка задачи

Если имеется трехкомпонентный материал (сплав), то для описания диффузии в нем достаточно двух концентраций и двух диффузионных потоков:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1 &= -D_{11}\nabla C_1 - D_{12}\nabla C_2, \\ \mathbf{J}_2 &= -D_{21}\nabla C_1 - D_{22}\nabla C_2, \\ C_1 + C_2 + C_3 &= 1. \end{aligned} \quad (7)$$

Используя уравнения баланса для неподвижной среды

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k, \quad k=1,2,$$

где  $\nabla \cdot (\dots)$  — оператор дивергенции, получим систему двух связанных диффузионных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial t} &= \nabla \cdot (D_{11}\nabla C_1 + D_{12}\nabla C_2), \\ \frac{\partial C_2}{\partial t} &= \nabla \cdot (D_{21}\nabla C_1 + D_{22}\nabla C_2). \end{aligned}$$

При диффузии двух элементов в системе двух и более слоев подобные уравнения записываются для каждого слоя, причем коэффициенты диффузии в слоях различны. Условия на границах раздела слоев должны отражать непрерывность диффузионных потоков и в случае идеальных контактов — непрерывность химических потенциалов. Например, в двухслойной системе имеем:

$$\mathbf{J}_1|_A = \mathbf{J}_1|_B; \quad g_1|_A = g_1|_B, \quad \mathbf{J}_2|_A = \mathbf{J}_2|_B, \quad g_2|_A = g_2|_B, \quad (8)$$

или с учетом выражений (7) для потоков и зависимостей химических потенциалов от состава условия (8) перепишем так:

$$D_{11}^A \nabla C_1^A + D_{12}^A \nabla C_2^A = D_{11}^B \nabla C_1^B + D_{12}^B \nabla C_2^B = X, \quad (9)$$

$$C_1^A = \gamma_1 C_1^B, \quad (10)$$

$$D_{21}^A \nabla C_1^A + D_{22}^A \nabla C_2^A = D_{21}^B \nabla C_1^B + D_{22}^B \nabla C_2^B = Y, \quad (11)$$

$$C_2^A = \gamma_2 C_2^B, \quad (12)$$

где  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  — в общем случае функции концентраций, отражающие различие подвижностей компонентов в разных материалах,  $X$  и  $Y$  — промежуточные обозначения для потоков на границах раздела. Здесь и далее индексы буквенные соответствуют разным материалам, а цифровые 1 и 2 — разным компонентам. В соответствии с условиями (10) и (11) на границе раздела всегда имеется разрыв в концентрациях [55, 56].

Если элемент 1 изначально присутствует только в веществе  $A$ , а его концентрация не превышает предел растворимости в этом веществе и растворимость элемента 1 в материале  $B$  ограниченная, то на границе раздела вместо условия (10) записываем:

$$C_1^B = C_{1L}^B. \quad (13)$$

Таким образом, на границе раздела ставится условие насыщения — концентрация диффузанта на границе материала  $B$  фиксируется на уровне  $C_{1L}^B$ . Равновесие в этом случае поддерживается за счет перераспределения

концентрации в фазе  $A$  и перераспределения поступающего элемента вглубь  $B$ , но до достижения концентрацией величины  $C_{1L}^B$ . Если концентрация  $C_{1L}^B$  соответствует появлению новой фазы в материале  $B$ , то появляются новые условия на подвижной границе раздела фаз. Однако в данной работе они не рассматриваются.

При условии неидеального контакта между материалами, связанного, например, с шероховатостями поверхностей, для концентраций на границе раздела вместо (10) и (12) выполняются условия:

$$C_1^A - C_1^B = \frac{\delta}{D_{s1}} X, \quad C_2^A - C_2^B = \frac{\delta}{D_{s2}} Y, \quad (14)$$

что предполагает уменьшение начального разрыва в концентрациях со временем. Здесь  $\delta$  — параметр, характеризующий неидеальность контакта на границе раздела между двумя материалами, который, аналогично задачам контактного теплообмена [58], считается пропорциональным шероховатости поверхности. Единого способа описания контактного термического сопротивления, равно как и диффузионного сопротивления, до сих пор не существует.

Более общим вариантом граничных условий вместо (14) будет

$$g_1|_A - g_1|_B = \frac{\beta_1}{D_{s1}} X; \quad g_2|_A - g_2|_B = \frac{\beta_2}{D_{s1}} X,$$

где коэффициенты  $\beta_k$  требуют определения. Подобно  $\delta$ , коэффициенты  $\beta_k$  характеризуют «сопротивление диффузии» на границе раздела фаз (или материалов) из-за особенностей структуры поверхностей, наличия дефектов и чужеродных примесей. Они не являются фундаментальными константами или свойством материала; их, как и  $\delta$ , нельзя найти непосредственно из уравнений диффузии.

Подставляя химический потенциал из (4) в новое условие, например, для вещества 1 получим:

$$g_{10} + RTm_1^{-1} \ln(C_1^A \gamma_1^A (C_1^A)) - g_{10} - RTm_1^{-1} \ln(C_1^B \gamma_1^B (C_1^B)) = \frac{\beta_1}{D_{s1}} X$$

или

$$C_1^A = C_1^B \frac{\gamma_1^B}{\gamma_1^A} \exp \left[ \frac{m_1 \beta_1}{D_{s1} RT} X \right].$$

Подобные экспоненциальные условия для разрыва концентраций на границе связывают с явлением плохой смачиваемости. В этом случае коэффициент  $\beta_1$  должен быть пропорциональным коэффициенту поверхностного натяжения  $\sigma$ . Тогда для соблюдения размерности в коэффициенте  $\beta_1$  должна появиться плотность. Поскольку простейшие соображения не дают информации о том, плотность какого из материалов должна тут фигурировать, условно примем  $\rho = \rho_A C_1^A + \rho_B C_1^B$ , или еще проще  $\rho = (\rho_A + \rho_B)/2$ . В результате найдем:

$$C_1^A = C_1^B \frac{\gamma_1^B}{\gamma_1^A} \exp \left[ \frac{m_1 \sigma}{D_{s1} RT \rho} X \right].$$

При условии  $\frac{m_1 \sigma}{D_{s1} RT \rho} \ll 1$  из (14) имеем:

$$C_1^A = C_1^B \frac{\gamma_1^B}{\gamma_1^A} \left[ 1 + \frac{m_1 \sigma}{D_{s1} RT \rho} X \right],$$

что в пределе (при выравнивании концентраций в каждой фазе) приведет к условию (10).

В настоящей работе рассмотрим одномерную задачу о диффузионном взаимодействии двух контактирующих материалов через плоскую границу раздела с условиями двух типов:

- выражения (9)–(12) (тип I);
- выражения (9), (11), (14) (тип II).

В начальный момент времени распределения концентраций в слоях считаем заданными. Размеры областей  $A$  и  $B$  принимаем равными  $R$  и  $H$  соответственно. На внешних границах источники и стоки компонентов отсутствуют.

В такой постановке задача соответствует металлам, неограниченно растворимым друг в друге в твердом состоянии или разным материалам, концентрации легирующих элементов в которых ниже пределов растворимости.

#### 4. Описание алгоритма

Для численного решения одномерной задачи с условиями на границе раздела типа I и II используем разделение по компонентам и трехточечную неявную разностную схему, которая является абсолютно устойчивой. Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени и второй по пространственной координате. Описанный ниже алгоритм можно обобщить для схемы Кранка–Николсон и схемы с весами, которые имеют более высокий порядок аппроксимации по пространственной координате [65, 66].

Дискретные аналоги одномерных уравнений диффузии примут вид:

$$\frac{Y_{1,i}^A - \check{Y}_{1,i}^A}{\Delta t} = D_{11}^A \frac{Y_{1,i+1}^A - 2Y_{1,i}^A + Y_{1,i-1}^A}{h_A^2} + D_{12}^A \frac{\check{Y}_{2,i+1}^A - 2\check{Y}_{2,i}^A + \check{Y}_{2,i-1}^A}{h_A^2};$$

$$\frac{Y_{2,i}^A - \check{Y}_{2,i}^A}{\Delta t} = D_{21}^A \frac{\check{Y}_{1,i+1}^A - 2\check{Y}_{1,i}^A + \check{Y}_{1,i-1}^A}{h_A^2} + D_{22}^A \frac{Y_{2,i+1}^A - 2Y_{2,i}^A + Y_{2,i-1}^A}{h_A^2}$$

и

$$\frac{Y_{1,i}^B - \check{Y}_{1,i}^B}{\Delta t} = D_{11}^B \frac{Y_{1,i+1}^B - 2Y_{1,i}^B + Y_{1,i-1}^B}{h_B^2} + D_{12}^B \frac{\check{Y}_{2,i+1}^B - 2\check{Y}_{2,i}^B + \check{Y}_{2,i-1}^B}{h_B^2};$$

$$\frac{Y_{2,i}^B - \check{Y}_{2,i}^B}{\Delta t} = D_{21}^B \frac{\check{Y}_{1,i+1}^B - 2\check{Y}_{1,i}^B + \check{Y}_{1,i-1}^B}{h_B^2} + D_{22}^B \frac{Y_{2,i+1}^B - 2Y_{2,i}^B + Y_{2,i-1}^B}{h_B^2}.$$

Здесь  $\Delta t$  — шаг по времени;  $h_A, h_B$  — шаги по координате, разные для разных материалов;  $Y_{k,i}^s$  — разностные аналоги концентраций  $C_k^s$  в точках с номером  $i$ ;  $s = A, B$ ;  $k = 1, 2$ ;  $\check{Y}_{1,i}^A, \check{Y}_{2,i}^A, \check{Y}_{1,i}^B, \check{Y}_{2,i}^B$  — концентрации с предыдущего шага по времени.

Далее каждое уравнение приводится к виду:

$$A_{k,i}^s Y_{k,i-1}^s - C_{k,i}^s Y_{k,i}^s + B_{k,i}^s Y_{k,i+1}^s = -F_{k,i}^s,$$

где  $s = A, B, k = 1, 2$ . Чтобы не загромождать текст, формулы для коэффициентов не приводим.

При решении задачи применим левый вариант метода прогонки, в соответствии с которым

$$Y_{k,i}^s = \xi_{k,i}^s Y_{k,i-1}^s + \eta_{k,i}^s,$$

где по-прежнему  $s = A, B, k = 1, 2$  и

$$\xi_{k,i}^s = \frac{A_{k,i}^s}{C_{k,i}^s - B_{k,i}^s \cdot \xi_{k,i+1}^s}, \quad \eta_{k,i}^s = \frac{B_{k,i}^s \eta_{k,i+1}^s + F_{k,i}^s}{C_{k,i}^s - B_{k,i}^s \cdot \xi_{k,i+1}^s}.$$

Внешние граничные условия аппроксимируем стандартным способом. Особенность возникает при аппроксимации условий на границе раздела материалов, так как здесь существует по две концентрации каждого из компонентов. Продемонстрируем это для условий типа I и компонента 1.

Пусть границе раздела соответствует номер  $i^*$ . Представим концентрации компонента 1 в точках  $i^* - 1$  и  $i^* + 1$  (то есть слева и справа от границы раздела) в виде рядов Тейлора относительно концентраций в некоторой точке  $i^*$ :

$$Y_{1,i^*-1}^A = Y_{1,i^*}^A - \left( \frac{\partial Y_1^A}{\partial x} \right)_{i^*} h_A + \left( \frac{\partial^2 Y_1^A}{\partial x^2} \right)_{i^*} \frac{h_A^2}{2};$$

$$Y_{1,i^*+1}^B = Y_{1,i^*}^B + \left( \frac{\partial Y_1^B}{\partial x} \right)_{i^*} h_B + \left( \frac{\partial^2 Y_1^B}{\partial x^2} \right)_{i^*} \frac{h_B^2}{2}.$$

Вторые производные найдем из самих дифференциальных уравнений, очевидно, справедливых для этой точки:

$$\frac{\partial^2 Y_1^A}{\partial x^2} = \frac{1}{D_{11}^A} \left( \frac{\partial Y_1^A}{\partial t} - D_{12}^A \frac{\partial^2 \check{Y}_2^A}{\partial x^2} \right); \quad \frac{\partial^2 Y_1^B}{\partial x^2} = \frac{1}{D_{11}^B} \left( \frac{\partial Y_1^B}{\partial t} - D_{12}^B \frac{\partial^2 \check{Y}_2^B}{\partial x^2} \right).$$

Это приведет к соотношениям:

$$Y_{1,i^*-1}^A = Y_{1,i^*}^A \left[ 1 + \frac{h_A^2}{2\Delta t D_{11}^A} \right] - \left( \frac{\partial Y_1^A}{\partial x} \right)_{i^*} h_A - \frac{h_A^2}{2} \frac{1}{D_{11}^A \Delta t} \left( \check{Y}_{1,i^*}^A + \Delta t D_{12}^A \left( \frac{\partial^2 \check{Y}_2^A}{\partial x^2} \right)_{i^*} \right), \quad (15)$$

$$Y_{1,i^*+1}^B = Y_{1,i^*}^B \left[ 1 + \frac{h_B^2}{2\Delta t D_{11}^B} \right] + \left( \frac{\partial Y_1^B}{\partial x} \right)_{i^*} h_B + \frac{h_B^2}{2} \frac{1}{D_{11}^B \Delta t} \left( \check{Y}_{1,i^*}^B + \Delta t D_{12}^B \left( \frac{\partial^2 \check{Y}_2^B}{\partial x^2} \right)_{i^*} \right). \quad (16)$$

Далее, используя первое условие (13):

$$Y_{1,i^*}^A = Y_{1,i^*}^B - \frac{\delta}{D_{s1}} \left( D_{11}^B \frac{\partial Y_1^A}{\partial x} + D_{12}^A \frac{\partial \check{Y}_2^A}{\partial x} \right), \quad (17)$$

из (15), (16) получим:

$$\left(\frac{\partial Y_1^A}{\partial x}\right)_{i^*} = \frac{Y_{1,i^*}^B \left(1 + \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2}\right) - \frac{\delta D_{12}^A}{D_{s1}} \left(1 + \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2}\right) \left(\frac{\partial \check{Y}_2^A}{\partial x}\right)_{i^*} - \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2} Y_{1,i^*-1}^A - \check{Y}_{1,i^*}^A - \Delta t D_{12}^A \left(\frac{\partial^2 \check{Y}_2^A}{\partial x^2}\right)_{i^*}}{\frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A} \left[\frac{\delta h_A}{2D_{s1} \Delta t} \left(1 + \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2}\right) + 1\right]},$$

$$\left(\frac{\partial Y_1^B}{\partial x}\right)_{i^*} = \frac{Y_{1,i^*+1}^B - Y_{1,i^*}^B \left[1 + \frac{h_B^2}{2\Delta t D_{11}^B}\right]}{h_B} + \frac{h_B}{2} \frac{1}{D_{11}^B \Delta t} \left(\check{Y}_{1,i^*}^B + \Delta t D_{12}^B \left(\frac{\partial^2 \check{Y}_2^B}{\partial x^2}\right)_{i^*}\right).$$

Подставляем найденные градиенты в граничное условие (9)

$$D_{11}^A \frac{\partial Y_1^A}{\partial x} + D_{12}^A \frac{\partial \check{Y}_2^A}{\partial x} = D_{11}^B \frac{\partial Y_1^B}{\partial x} + D_{12}^B \frac{\partial \check{Y}_2^B}{\partial x}$$

и группируем слагаемые. В результате приходим к выражению:

$$A_* Y_{k,i^*-1} - C_* Y_{k,i^*} + B_* Y_{k,i^*+1} = -F_*,$$

где

$$A_* = \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2}, \quad B_* = \frac{2D_{11}^B \Delta t}{h_B^2} \frac{1}{\Delta t} \frac{h_B}{2} \Omega_1,$$

$$C_* = \left(1 + \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2}\right) + \left(1 + \frac{2D_{11}^B \Delta t}{h_B^2}\right) \frac{1}{\Delta t} \frac{h_B}{2} \Omega_1,$$

$$F_* = Y_{1,i^*}^A + Y_{1,i^*}^B \frac{h_B}{2\Delta t} \Omega_1 + D_{12}^B \frac{h_B}{2} \Omega_1 \left(\frac{\partial^2 Y_2^B}{\partial x^2}\right)_{i^*} + \Delta t D_{12}^A \left(\frac{\partial^2 Y_2^A}{\partial x^2}\right)_{i^*} + D_{12}^B \frac{\partial Y_2^B}{\partial x} \Omega_1 + \left(\frac{\partial Y_2^A}{\partial x}\right)_{i^*} \cdot \left[\frac{\delta D_{12}^A}{D_{s1}} \left(1 + \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2}\right) - D_{12}^A \Omega_1\right], \quad (18)$$

$$\Omega_1 = \frac{2\Delta t}{h_A} \left[\frac{\delta h_A}{2D_{s1} \Delta t} \left(1 + \frac{2D_{11}^A \Delta t}{h_A^2}\right) + 1\right].$$

Для компонента 2 все действия аналогичны.

Вторые производные с нижнего слоя определяем по известным значениям концентраций со вторым порядком аппроксимации.

В итоге прогонка сводится к следующему. Сначала рассчитываем коэффициенты  $(A_{k,i}^B, C_{k,i}^B, B_{k,i}^B, F_{k,i}^B)$  и прогнозные коэффициенты в области  $B$ . Дойдя до точки  $i^*$  вычисляем коэффициенты по формулам вида (18) и находим:

$$\xi_{k,i^*} = \frac{A_*}{C_* - B_* \cdot \xi_{k,i^*+1}^B}; \quad \eta_{k,i^*} = \frac{B_* \eta_{k,i^*+1}^B + F_*}{C_* - B_* \cdot \xi_{k,i^*+1}^B}.$$

Далее рассчитываем все коэффициенты для области  $A$ .

В обратном направлении (обратная прогонка) при переходе через границу раздела концентрацию в точке  $i^*$  для области  $B$  пересчитываем из граничных условий вида (17).

Для иллюстрации особенностей модели с неидеальным контактом используем величины коэффициентов, соответствующих по порядку экспериментальным из [67]. К сожалению, сведения по перекрестным диффузионным коэффициентам в литературе практически отсутствуют или содержатся в недоступных базах данных. Выбранные для примеров величины коэффициентов переноса близки к коэффициентам диффузии металлов друг в друге (по порядку) при температурах, когда диффузия становится заметной. Однако информация у разных авторов может существенно различаться, тем более, если речь идет о диффузии в многокомпонентных сплавах. Применение алгоритма к задачам диффузии, отвечающим конкретным условиям эксперимента, может быть полезным, аналогично [53], для оценки коэффициентов.

Сходимость описанного алгоритма проверяли, изменяя число разбиений расчетных областей (число точек разностной сетки в слоях). Примеры представлены в таблице, где  $n_A$  и  $n_B$  — число точек в области  $A$  и  $B$ , шаг по времени составлял:  $\Delta t = 0.02$  с. Границе раздела соответствует точка  $x = 0$ . При исследовании сходимости приняты коэффициенты диффузии:  $D_{1,1}^A = D_{2,2}^A = D_{1,1}^B = D_{2,2}^B = 10^{-3}$  см<sup>2</sup>/с; перекрестные коэффициенты

**Таблица.** Результаты расчетов концентраций компонента 1

Количество точек	Область А			Область В		
	-0.075	-0.05	-0.025	0.025	0.05	0.075
$n_A = n_B = 0.5$	0.063	0.08	0.09	0.177	0.234	0.277
$n_A = n_B = 10$	0.085	0.099	0.122	0.206	0.259	0.297
$n_A = n_B = 25$	0.102	0.120	0.147	0.231	0.278	0.313
$n_A = n_B = 50$	0.108	0.128	0.157	0.240	0.285	0.319
$n_A = n_B = 100$	0.114	0.135	0.166	0.247	0.291	0.324
$n_A = n_B = 200$	0.116	0.138	0.170	0.250	0.295	0.326

полагали равными нулю. В начальный момент времени концентрации в областях А и В составляли:  $Y_{1,0}^A = 0.5$ ;  $Y_{2,0}^A = 0$ ;  $Y_{1,0}^B = 0$ ;  $Y_{2,0}^B = 0.5$ .

Из таблицы следует, что при фиксированном значении шага по времени и увеличении количества разбиений расчетной области решение стремится к некоторому предельному значению, а это указывает на сходимость численного решения при уменьшении шага по пространству. Фактически рисунок 1 иллюстрирует результаты, приведенные в таблице. Глядя на рисунок также можно заметить, что с уменьшением шага по пространству кривая становится более гладкой.

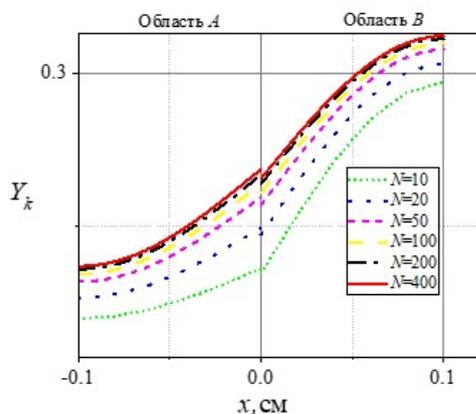
На корректность решения указывает выполнение закона сохранения масс. Для каждого момента времени количество вещества в системе остается одинаковым для любых вариантов расчетов. В качестве тестов выполнены расчеты с одинаковыми коэффициентами диффузии в разных материалах; задавались разные начальные распределения в материалах при идеальном контакте; принимались нулевые перекрестные коэффициенты диффузии. Во всех этих вариантах наблюдаются физически верные результаты. Дополнительным тестом можно считать задачу диффузии с симметричными начальными условиями и одинаковыми коэффициентами диффузии в разных материалах. В результате перераспределения концентраций всегда приходим к симметричным распределениям.

Заметим, что термодинамических ограничений недостаточно для получения физически корректных решений задач теории многокомпонентной диффузии. Положительная определенность матрицы коэффициентов  $L_{ki}$  не означает положительную определенность матрицы коэффициентов диффузии. Эта проблема обсуждается в литературе много лет [68–73], но до сих пор остается открытой. При решении конкретных задач найденные в литературе диффузионные коэффициенты не всегда удовлетворяют условиям корректности.

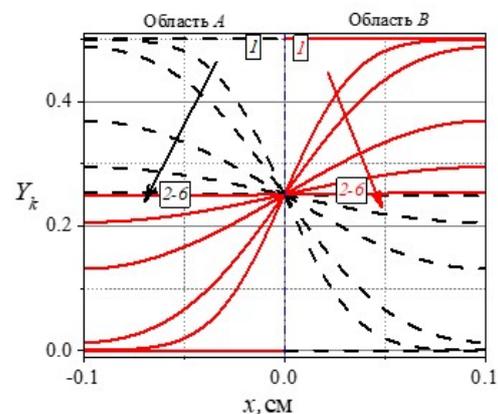
Далее для иллюстраций принято:  $R = H = 0.1$  см;  $n_A = 400$ ;  $n_B = 400$ .

На рисунке 2 представлено решение задачи с симметричными начальными условиями  $Y_{1,0}^A = 0.5$ ;  $Y_{2,0}^A = 0$  и  $Y_{1,0}^B = 0$ ;  $Y_{2,0}^B = 0.5$  для областей А и В и коэффициентами диффузии:  $D_{1,1}^A = D_{2,2}^A = D_{1,1}^B = D_{2,2}^B = 10^{-3}$  см<sup>2</sup>/с. Перекрестные коэффициенты приняты равными нулю.

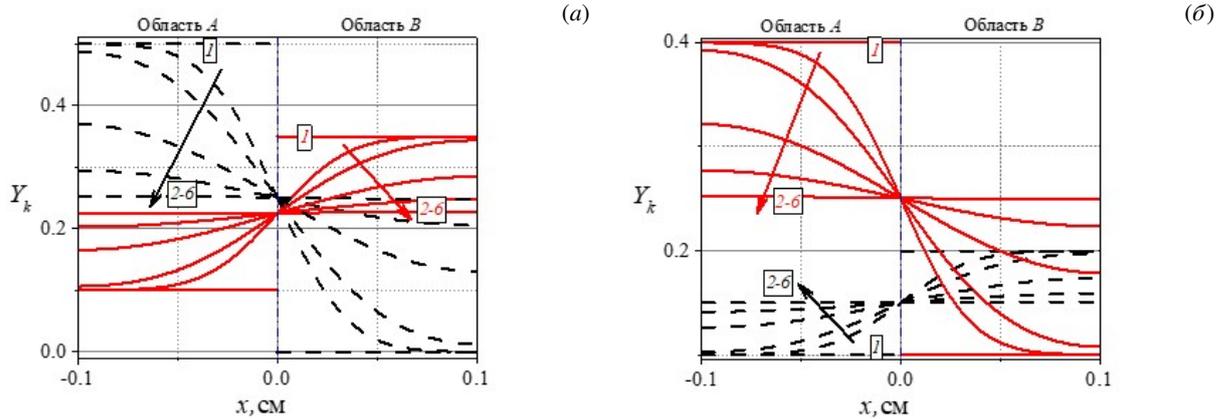
Решения тестовых задач с другими начальными условиями и теми же коэффициентами диффузии представлены на рисунке 3. Начальным распределениям соответствуют горизонтальные линии 1. Очевидно, что начальное распределение оказывает влияние на перераспределение концентраций. О сохранении массы говорит равенство площадей под кривыми 1 и 6 для каждого из диффузантов.



**Рис. 1.** Распределения концентраций в материале при наличии неидеального контакта ( $\delta = 10^{-2}$ ) в момент времени  $t = 20$  с; кривые представлены для компонента, диффундирующего только из одной области;  $N = n_A + n_B$  – общее узлов расчетной области



**Рис. 2.** Распределения концентраций при различных начальных условиях в разные моменты времени  $t$ , с: 0 (кривая 1); 5 (2); 10 (3); 20 (4); 30 (5); 59 (6); компоненту 1 соответствуют пунктирные линии, компоненту 2 – сплошные линии

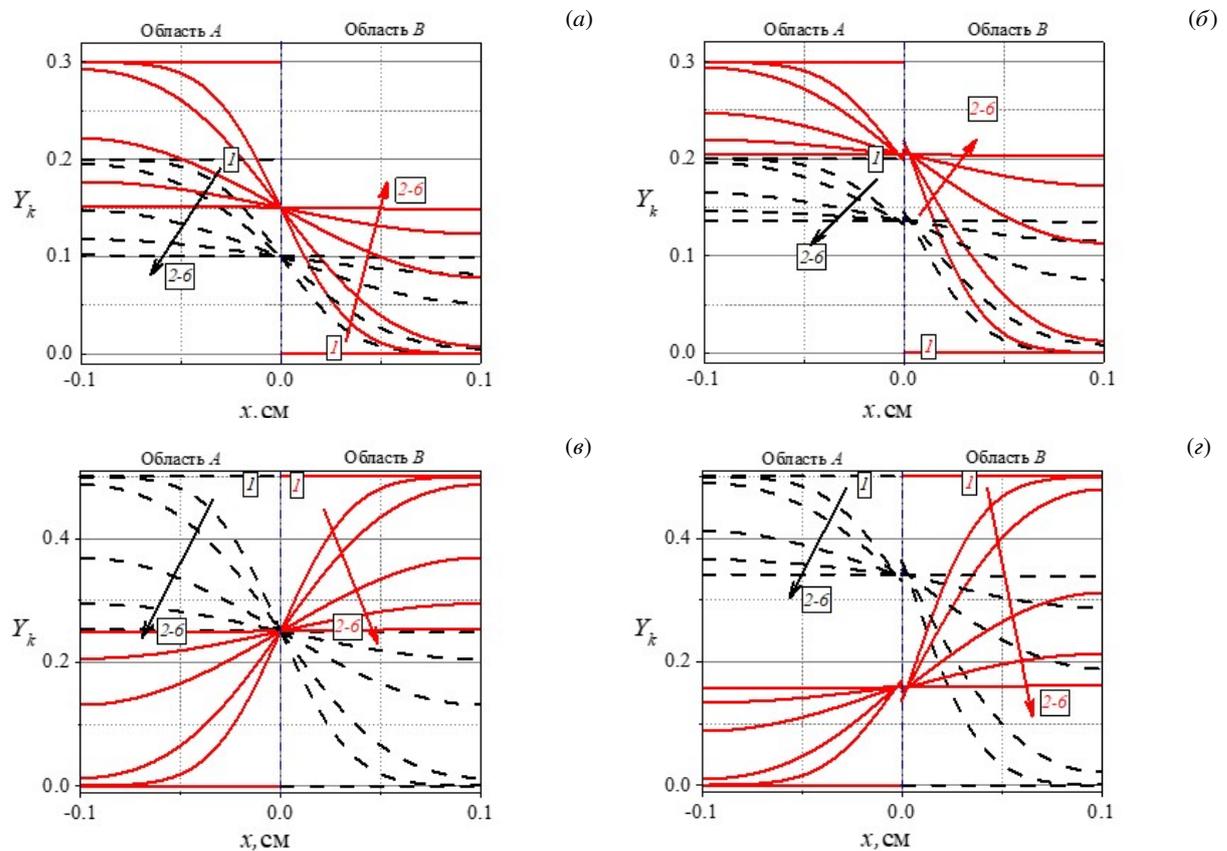


**Рис. 3.** Распределения концентраций в разные моменты времени  $t$ , с: 0 (кривая 1); 5 (2); 10 (3); 20 (4); 30 (5); 59 (6) при различных начальных условиях в областях  $A$  и  $B$ :  $Y_{1,0}^A=0.5, Y_{2,0}^A=0.1, Y_{1,0}^B=0, Y_{2,0}^B=0.35$  (а);  $Y_{1,0}^A=0, Y_{2,0}^A=0.4, Y_{1,0}^B=0.2, Y_{2,0}^B=0$  (б); компоненту 1 соответствуют пунктирные линии, компоненту 2 – сплошные линии

### 5. Результаты расчетов

Ниже представлены иллюстрации для двух вариантов начальных распределений концентраций. Начальным распределениям соответствуют горизонтальные линии  $1$ . Результаты расчетов показывают, что неидеальный контакт между материалами оказывает существенное влияние на распределение концентраций в окрестности границ раздела. Для рисунка 4 принято:  $D_{1,1}^A = D_{2,2}^A = D_{1,1}^B = D_{2,2}^B = 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ , а перекрестные коэффициенты равны нулю.

Видим, что неидеальный контакт между двумя материалами приводит к появлению разрыва в концентрациях, который с течением времени стремится к нулю. Кроме того, при наличии диффузионного сопротивления замедляется процесс диффузии и затягивается установление равновесного распределения концентраций в

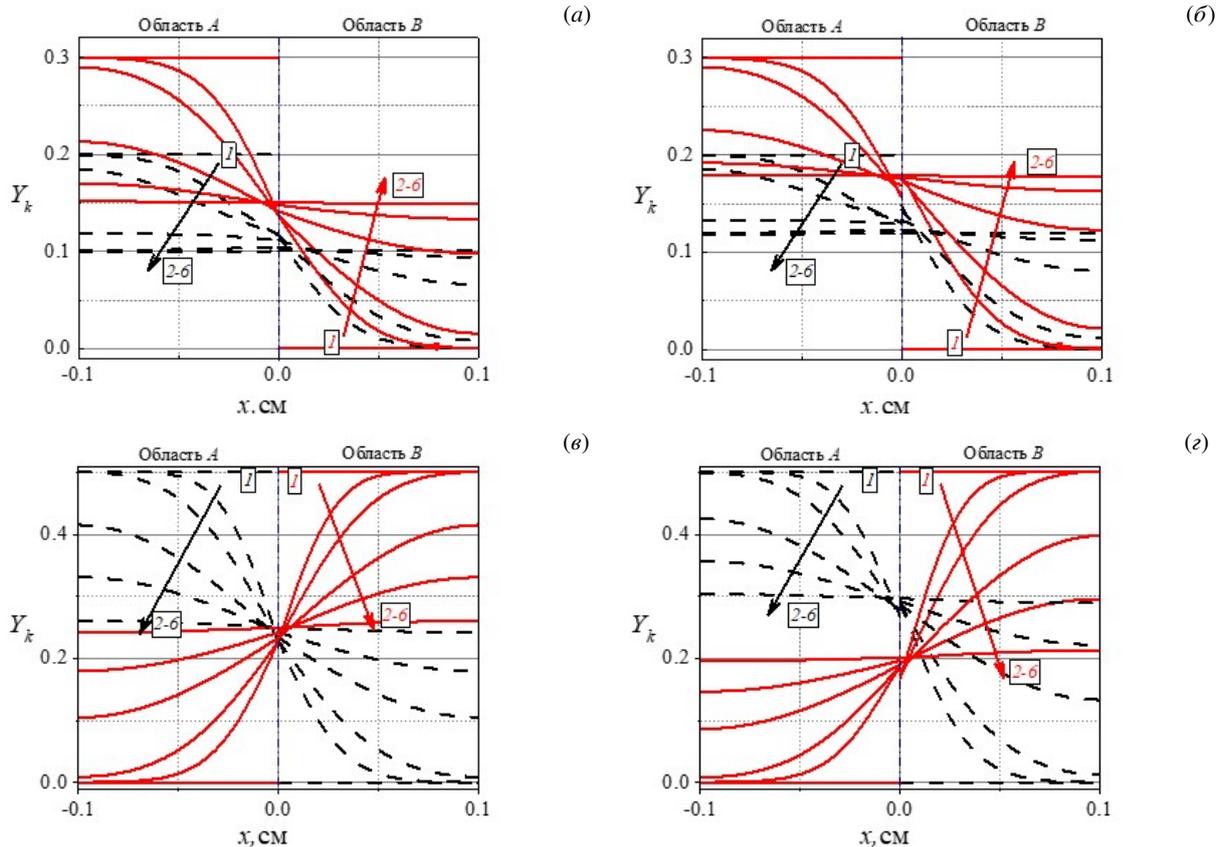


**Рис. 4.** Распределения концентраций в материалах  $A$  (а, б) и  $B$  (в, з) при идеальном,  $\delta = 0$ , (а, в) и неидеальном,  $\delta = 1.5 \cdot 10^{-2}$ , (б, з) контакте в разные моменты времени  $t$ , с: 0 (кривая 1); 5 (2); 10 (3); 20 (4); 30 (5); 59 (6) при различных начальных условиях для концентраций:  $Y_{1,0}^A=0.2, Y_{2,0}^A=0.3, Y_{1,0}^B=0.1, Y_{2,0}^B=0$  (а, б);  $Y_{1,0}^A=0.5, Y_{2,0}^A=0, Y_{1,0}^B=0, Y_{2,0}^B=0.5$  (в, з); компоненту 1 соответствуют пунктирные линии, компоненту 2 – сплошные линии

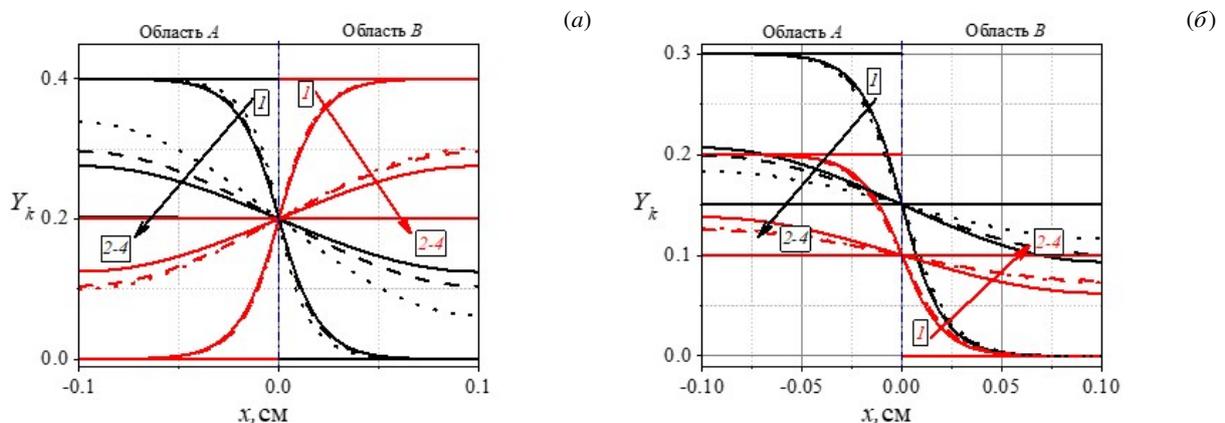
системе. Результат аналогичен для любых вариантов начальных распределений.

Установление связи между величиной контактного сопротивления, коэффициентами поверхностной диффузии, структурой поверхностей и явлением смачивания представляет собой отдельную задачу.

При наличии перекрестных коэффициентов диффузии происходит изменение формы кривых концентраций (Рис. 5): различие перекрестных коэффициентах является причиной нарушения симметрии в распределениях даже при симметричном начальном распределении. Замечено замедление процесса выравнивания концентраций для заданного набора коэффициентов диффузии:  $D_{1,1}^A = 10^{-3}$ ;  $D_{1,2}^A = 5 \cdot 10^{-4}$ ;  $D_{2,1}^A = 10^{-4}$ ;  $D_{2,2}^A = 10^{-3}$ ;  $D_{1,1}^B = 10^{-3}$ ;  $D_{1,2}^B = 10^{-4}$ ;  $D_{2,1}^B = 5 \cdot 10^{-4}$ ;  $D_{2,2}^B = 10^{-3}$  см<sup>2</sup>/с. Неидеальный контакт влияет на распределение концентраций аналогично предыдущему варианту, т.е. приводит к появлению разрыва в концентрациях.



**Рис. 5.** Распределения концентраций в материалах А (а, б) и В (в, з) при идеальном,  $\delta = 0$ , (а, в) и неидеальном,  $\delta = 1.5 \cdot 10^{-2}$ , (б, з) контакте в разные моменты времени  $t$ , с: 0 (кривая 1); 5 (2); 10 (3); 20 (4); 30 (5); 59 (6) при учете перекрестных диффузионных потоков;  $Y_{1,0}^A = 0.2, Y_{2,0}^A = 0.3, Y_{1,0}^B = 0.1, Y_{2,0}^B = 0$  (а, б);  $Y_{1,0}^A = 0.5, Y_{2,0}^A = 0, Y_{1,0}^B = 0, Y_{2,0}^B = 0.5$  (в, з); компоненту 1 соответствуют пунктирные линии, компоненту 2 – сплошные линии



**Рис. 6.** Распределения концентраций в материалах А (а, б) и В (в, з) в разные моменты времени  $t$ , с: 0 (кривая 1); 1 (2); 10 (3); 30 (4); 30 (5); 59 (6) при учете различных перекрестных диффузионных потоков:  $D_{1,2}^p = D_{2,1}^p = D_{1,2}^m = D_{2,1}^m = 10^{-3}$  см<sup>2</sup>/с (штриховые линии);  $D_{1,2}^p = D_{1,2}^m = 3 \cdot 10^{-3}, D_{2,1}^p = D_{2,1}^m = 10^{-3}$  см<sup>2</sup>/с (точечные линии); сплошные линии соответствуют нулевым перекрестным коэффициентам;  $Y_{1,0}^A = 0.4, Y_{2,0}^A = 0, Y_{1,0}^B = 0, Y_{2,0}^B = 0.4$  (а);  $Y_{1,0}^A = 0.3, Y_{2,0}^A = 0.2, Y_{1,0}^B = 0, Y_{2,0}^B = 0$  (б)

Непосредственно влияние перекрестных коэффициентов диффузии проиллюстрировано на рисунке 6, при этом диагональные коэффициенты были следующими:  $D_{1,1}^A = D_{2,2}^A = D_{1,1}^B = D_{2,2}^B = 5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ . Перекрестные коэффициенты диффузии варьировались. Их изменение по-разному сказывается на ускорении и/или замедлении диффузии.

## 6. Выводы

Таким образом, в работе описаны возможные варианты граничных условий для сопряженных диффузионных задач при наличии неидеального контакта между материалами. Показано, что в рамках термодинамики получает обоснование условие с экспоненциальной зависимостью разрыва в концентрациях от температуры. Разработан алгоритм численного решения задачи, основанный на покомпонентном разделении уравнений и неявной разностной схеме. Показана сходимость алгоритма на примере диффузии в окрестности границы раздела материалов разного начального состава.

Проиллюстрировано, что следствием неидеального контакта является разрыв в концентрациях на границе раздела, который с течением времени стремится к нулю. Перекрестные коэффициенты диффузии изменяют форму концентрационных кривых, но не влияют на качественное поведение концентраций, связанное с наличием неидеального контакта между материалами.

Предложенный алгоритм и варианты граничных условий применимы для решения как изотермических, так и неизотермических диффузионных задач, встречающихся при соединении и синтезе новых материалов. Возможно обобщение алгоритма на задачи с коэффициентами диффузии, зависящими от состава и от температуры. При достижении пределов растворимости элементов в материалах возможно появление новых фаз. Учет этого факта приведет к задачам с дополнительными границами раздела, положение которых будет зависеть от времени. Условие неидеальности на контакте разных материалов будут оказывать влияние на динамику роста фаз. На основе решения подобных задач возможна оценка механических напряжений, связанных с изменением состава. Напряжения, в свою очередь, могут оказывать влияние на диффузионные процессы.

Работа выполнена по Программе фундаментальных научных исследований ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2022-0003.

## Литература

1. *Гегузин Я.Е.* Диффузионная зона. М.: Наука, 1979. 343 с.
2. *Barah O.O., Natukunda F., Bori I., Ukagwu K.J.* Mechanisms and modelling of diffusion in solids: a multiscale framework with industrial case studies and AI enhancements // *Discover Sustainability*. 2025. Vol. 6. P. 804. DOI: 10.1007/s43621-025-01746-0
3. *Mehrer H.* Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes. Berlin; Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2007. 654 p. DOI: 10.1007/978-3-540-71488-0
4. *Wei Y., Zhu L., Li Y., Chen Y., Guo B.* Formation mechanism and microstructure evolution of Cu/Ti diffusion bonding interface and its influence on joint properties // *Vacuum*. 2023. Vol. 213. 112167. DOI: 10.1016/j.vacuum.2023.112167
5. *Wei S., Li Y., Zhang R., Chen H., Liang T., Yin W.* Microstructure and mechanical properties of Zr-W and Zr-Ta-W interface fabricated by hot isostatic pressing diffusion welding // *Journal of Nuclear Materials*. 2025. Vol. 606. 155627. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2025.155627
6. *Li G., Akbar A., Zhang L.-W., Rosei F., Liew K.M.* Surface modification strategy for controlling wettability and ionic diffusion behaviors of calcium silicate hydrate // *Applied Surface Science*. 2023. Vol. 622. 156993. DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.156993
7. *Zhao S., Zhu J., Yang Z., Zhu Y., Sun H., Zhao L.* Interface and crystallization evolution induced by reactive nitrogen and oxygen sputtering in Ni/Ti multilayer // *Surface and Coatings Technology*. 2023. Vol. 472. 129941. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2023.129941
8. *Bose S.* Oxidation- and Corrosion-Resistant Coatings // *High Temperature Coatings* / ed. by S. Bose. 2nd ed. Oxford: Elsevier, 2018. P. 97–198. DOI: 10.1016/B978-0-12-804622-7.00006-1
9. *Cui Y., Zhao J., Zhao Y., Shao J.* Diffusion of metal ions from a substrate into oxide coatings // *Optical Materials Express*. 2016. Vol. 6, no. 10. P. 3119–3126. DOI: 10.1364/OME.6.003119
10. *Третьяков Ю.Д.* Твердофазные реакции. М.: Химия, 1978. 360 с.
11. *Dybkov V.I.* Reaction Diffusion and Solid State Chemical Kinetics. Trans Tech Publications, 2010. 334 p. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSFo.67-68
12. *Reiss H.* Diffusion-Controlled Reactions in Solids // *Journal of Applied Physics*. 1959. Vol. 30. P. 1141–1152. DOI: 10.1063/1.1735284
13. *Katona G.L., Safonova N.Y., Ganss F., Mitin D., Vladymyrskiy I.A., Sidorenko S.I., Makogon I.N., Beddies G., Albrecht M., Beke D.L.* Diffusion and solid state reactions in Fe/Ag/Pt and FePt/Ag thin-film systems // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015. Vol. 48. 175001. DOI: 10.1088/0022-3727/48/17/175001

14. *Ding F., Wang Q., Liang C., Zhang Y.* Diffusion behavior and microstructural evolution of bonding interface between AuSn20 and tungsten-copper alloy // *Soldering & Surface Mount Technology*. 2025. Vol. 37, no. 5. P. 333–341. DOI: 10.1108/SSMT-11-2024-0066
15. *Wang Y., Huang Y., Liu W., Chen B., Liu J., Zhang L., Liu W., Ma Y.* Investigation of diffusion reaction mechanism between W20Ta solid solution and Ni // *Materials Characterization*. 2023. Vol. 200. 112894. DOI: 10.1016/j.matchar.2023.112894
16. *Xu D., Chen P., Fu K., Sang C., Chen R., Hong T., Cheng J., Xu K.* Connection reinforcement design of ODS-W/Cu joint: Transforming immiscible interface into dual reaction diffusion interface // *Materials Characterization*. 2025. Vol. 228. 115402. DOI: 10.1016/j.matchar.2025.115402
17. *Ding Y., Wen D., Wang X., et al.* Interface Evolution and Mechanical Properties of Al/Ta Laminated Composites Fabricated by Vacuum-Embedded Diffusion Welding // *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*. 2025. Vol. 133. 107302. DOI: 10.2139/ssrn.5239598
18. *Ma J., Xu W., Zheng C., Li Y., Feng X., Yang Y.* Effect of trace Al and Ti elements on borosilicate glass corrosion resistance of Inconel 690 alloy // *Journal of Nuclear Materials*. 2025. Vol. 606. 155626. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2025.155626
19. *Страумал А.Б., Мазилкин И.А., Цой К.В., Барецки Б., Страумал Б.Б.* Фазовые переходы “смачивания” второй твердой фазой на линейных дефектах - тройных стыках границ зерен // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2020. Т. 112, № 4. С. 275–280. DOI: 10.31857/S1234567820160107
20. *Бокштейн Б.С., Ярославцев А.Б.* Диффузия атомов и ионов в твердых телах. М.: МИСиС, 2005. 362 с.
21. *Ворошин Л.Г., Витязь П.А., Насыбуллин А.Х., Хусид Б.М.* Многокомпонентная диффузия в гетерогенных сплавах. Минск: Вышэйшая школа, 1984. 142 с.
22. *Де Гроот С.Р., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. 458 с.
23. *Гуров К.П., Карташкин Б.А., Угасте Ю.Э.* Взаимная диффузия в многофазных металлических системах. М.: Наука, 1981. 350 с.
24. *Гуров К.П.* Феноменологическая термодинамика необратимых процессов. М.: Наука, 1978. 128 с.
25. *Дьярмати И.* Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974. 304 с.
26. *Князева А.Г.* Перекрестные эффекты в твердых средах с диффузией // *Прикладная механика и техническая физика*. 2003. Т. 44, № 3. С. 85–99.
27. *Князева А.Г.* Диффузия и реология в локально-равновесной термодинамике // *Вестник Пермского государственного технического университета. Математическое моделирование систем и процессов*. 2005. № 13. С. 45–60.
28. *Князева А.Г.* Нелинейные модели деформируемых сред с диффузией // *Физическая мезомеханика*. 2011. № 6. С. 35–51.
29. *Князева А.Г., Демидов В.Н.* Коэффициенты переноса для трехкомпонентного деформируемого сплава // *Вестник Пермского государственного технического университета. Механика*. 2011. № 3. С. 84–99.
30. *Князева А.Г.* Термодинамическое обобщение теории термоупругой диффузии для среды с изменяющейся плотностью // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2025. № 3. С. 101–113. DOI: 10.15593/pern.mech/2025.3.09
31. *Миколайчук М.А., Князева А.Г.* Модель диффузии примеси в структурно-неоднородной деформируемой среде // *Известия вузов. Физика*. 2012. Т. 55, № 5–2. С. 74–80.
32. *Миколайчук М.А., Князева А.Г., Грабовецкая Г.П., Мишин И.П.* Изучение влияния механических напряжений на диффузию в пластине с покрытием // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2012. № 3. С. 120–134.
33. *Миколайчук М.А., Князева А.Г.* Влияние напряжений и деформаций на перераспределение примеси в пластине в условиях одноосного нагружения // *Прикладная механика и техническая физика*. 2010. Т. 51, № 3. С. 147–157.
34. *Князева А.Г., Миколайчук М.А.* Насыщение пластины примесью из окружающей среды в условиях механического нагружения // *Известия Российской академии наук. Механика твердого тела*. 2011. № 5. С. 43–57.
35. *Zhang J., Zhao Q., Zhang L., Wang J., Sun C.* Molecular dynamics simulations based on the diffusion interface of solid-phase Ti–Al system // *Chemical Physics*. 2025. Vol. 597. 112797. DOI: 10.1016/j.chemphys.2025.112797
36. *Fan S., Peng M., Duan Y., Yu Q., Zhou X., Bu H., Li J., Yang Z., Li M.* Molecular dynamics simulation of diffusion mechanisms of Al–Mg interface // *Physica B: Condensed Matter*. 2025. Vol. 715. 417620. DOI: 10.1016/j.physb.2025.417620
37. *Zvyagintseva A.V.* Mathematical modeling of hydrogen diffusion in a medium with impurity and structural traps in the conditions of the formation and decomposition of hydrogen-containing complexes // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2025. Vol. 101. P. 112–119. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.12.047
38. *Акимова Е.Н., Горбачев И.И., Попов В.В.* Решение задач многокомпонентной диффузии с помощью параллельного алгоритма матричной прогонки // *Математическое моделирование*. 2005. Т. 17, № 9. С. 85–92.
39. *Chen L.-Q., Zhao Y.* From classical thermodynamics to phase-field method // *Progress in Materials Science*. 2022. Vol. 124. 100868. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2021.100868
40. *Mathew C.C., Song J., Adu-Gyamfi E., Fu Y.* Phase field numerical model for simulating the diffusion controlled stress corrosion cracking phenomena in anisotropic material // *Computational Materials Science*. 2025. Vol. 247. 113528. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113528

41. *Ngiam Y., Cao Z.H., Huang M.X.* Understanding hydrogen embrittlement in press-hardened steel by coupling phase field and hydrogen diffusion modeling // *Materials Science and Engineering: A*. 2022. Vol. 834. P. 142523. DOI: 10.1016/j.msea.2021.142523
42. *Chen Q., Ma N., Wu K., Wang Y.* Quantitative phase field modeling of diffusion-controlled precipitate growth and dissolution in Ti–Al–V // *Scripta Materialia*. 2004. Vol. 50, no. 4. P. 471–476. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2003.10.032
43. *Wu X.-W., Chen M., Ke L.-L.* An electro-thermo-mechanical coupling phase-field model of defect evolution induced by electromigration in interconnects // *International Journal of Mechanical Sciences*. 2025. Vol. 285. 109792. DOI: 10.1016/j.ijmesci.2024.109792
44. *Jacobsson E., Hallberg H., Hektor J., Ristinmaa M.* Modelling diffusive phase transformations in multiphase systems using the Voronoi implicit interface method // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2025. Vol. 33. 025006. DOI: 10.1088/1361-651X/ada818
45. *Kainuma R., Ichinose M., Ohnuma I., Ishida K.* Formation of  $\gamma'/\beta$  interface morphologies in Ni–Al–X ternary diffusion couples // *Materials Science and Engineering: A*. 2001. Vol. 312. P. 168–175. DOI: 10.1016/S0921-5093(00)01873-6
46. *Brechet Y., Kirkaldy J.S.* Parabolic periodic solutions of precipitation-modified ternary diffusion equations // *Canadian Journal of Physics*. 1992. Vol. 70. P. 193–198. DOI: 10.1139/p92-033
47. *Kulkarni K.N.* Analytical solution for interdiffusion in multicomponent systems and its application in high entropy alloys // *AIP Advances*. 2021. Vol. 11. 015116. DOI: 10.1063/5.0032837
48. *Князева А.Г., Савицкий А.П.* Оценка объемных изменений в диффузионной зоне. I. Изотермическое взаимодействие двух полубесконечных сред // *Известия вузов. Физика*. 1997. № 5. С. 19–27.
49. *Князева А.Г., Савицкий А.П.* Оценка объемных изменений в диффузионной зоне. II. Взаимодействие компонентов двух конечных сред // *Известия вузов. Физика*. 1997. № 6. С. 48–56.
50. *Mohanty R.R., Sohn Y.* Phase-field investigation of multicomponent diffusion in single-phase and two-phase diffusion couples // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2006. Vol. 27, no. 6. P. 676–683. DOI: 10.1007/BF02736572
51. *Morino T., Ode M., Hirose S.* Direct CALPHAD coupling phase-field model: Closed-form expression for interface composition satisfying equal diffusion potential condition // *Physical Review E*. 2024. Vol. 109. 065303. DOI: 10.1103/PhysRevE.109.065303
52. *Князева А.Г.* Некоторые диффузионные задачи, возникающие при анализе свойств покрытий // *Физическая мезомеханика*. 2001. Т. 4, № 1. С. 49–65.
53. *Бутов В.Г., Губарьков Д.В., Князева А.Г.* Распределение концентрации диффундирующего элемента в трехслойной системе и оценка коэффициента диффузии на основе решения обратной задачи // *Физическая мезомеханика*. 2000. Т. 3, № 6. С. 105–112.
54. *Князева А.Г., Романова В.А., Поболь И.Л.* Неоднородное поле напряжений в диффузионной зоне соединения, получаемого электронно-лучевой пайкой // *Физическая мезомеханика*. 2001. Т. 4, № 5. С. 41–53.
55. *Князева А.Г., Анисимова М.А., Коростелева Е.Н.* Особенности диффузионно-контролируемых процессов управляемого объемного синтеза из порошковых смесей Ti–Al–Fe–Fe<sub>2</sub>O<sub>2</sub> // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2022. № 3. С. 125–134. DOI: 10.15593/pern.mech/2022.3.13
56. *Князева А.Г., Поболь И.Л., Олещук И.Г.* Перераспределение легирующих элементов между соединяемыми материалами в условиях изотермической пайки и сопутствующие механические напряжения // *Известия вузов. Физика*. 2013. Т. 56, № 7–2. С. 14–24.
57. *Вендин С.В.* К решению задач нестационарной диффузии в слоистых средах // *Вестник Белгородского государственного технологического университета им. В.Г. Шухова*. 2019. № 3. С. 100–105. DOI: 10.34031/article\_5ca1f6340f3497.49776836
58. *Попов В.М.* Теплообмен в зоне контакта неразъемных соединений. М.: Энергия, 1971. 216 с.
59. *Zhang H., Huang D., Zhang Y.* A peridynamic thermal contact model for heat conduction analysis of thermally imperfect interface and conductive crack // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2025. Vol. 241. 126763. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.126763
60. *Ding W., Xue T., Zhang X.* A thermal-mechanical coupling modeling with imperfect interfaces: Transition from ballistic to diffusive heat transfer // *Applied Mathematical Modelling*. 2026. Vol. 150. 116361. DOI: 10.1016/j.apm.2025.116361
61. *Wang J., Xue T., Zhang X.* Time fractional-integer hybrid modeling for anomalous thermal contact problems // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2025. Vol. 251. 127338. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127338
62. *Zheng H., Zhang L., Dong Q., Sun G.* Prediction of the effective diffusion coefficient on sulfate ions in heterogeneous concrete based on Mori-Tanaka scheme // *Construction and Building Materials*. 2024. Vol. 449. 138326. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2024.138326
63. *Wang R., Wang P., Bhatt S., et al.* Phase-field modeling of diffusion bonding in 316H stainless steel: Impact of processing conditions on grain morphology and bonding quality // *Materials Science and Engineering: A*. 2025. Vol. 945. 149051. DOI: 10.1016/j.msea.2025.149051
64. *Анисимова М.А., Князева А.Г., Коростелева Е.Н., Повернов С.Е.* Особенности спекания порошковых составов CuO–Al и TiO<sub>2</sub>–Al в условиях регулируемого нагрева // *Химическая физика и мезоскопия*. 2024. Т. 26, № 4. С. 457–470. DOI: 10.62669/17270227.2024.4.38

65. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. М.: Наука, 1984. 288 с.
66. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
67. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Структура и свойства мегаллов и сплавов. Диффузия в металлах и сплавах. Киев: Наукова думка, 1987. 512 с.
68. Toor H.L. Solution of the linearized equations of multicomponent mass transfer: I // AIChE Journal. 1964. Vol. 10, no. 4. P. 448–455. DOI: 10.1002/aic.690100408
69. Вольперт А.И., Посвянский В.С. О положительности решения уравнений многокомпонентной диффузии и химической кинетики // Химическая физика. 1984. Т. 3, № 8. С. 1200–1205.
70. Wojewoda I., Lopez G.A., Zieba P., Mittemeijer E.I. Diffusion processes in diffusion-soldered interconnections // Archives of Metallurgy and Materials. 2004. Vol. 49, no. 2. P. 277–291.
71. Mincheva M., Siegel D. Nonnegativity and positiveness of solutions to mass action reaction–diffusion systems // Journal of Mathematical Chemistry. 2007. Vol. 42. P. 1135–1145. DOI: 10.1007/s10910-007-9292-0
72. Rios W.Q., Antunes B., Rodrigues A.E., Portugal I., Silva C.M. Accurate Effective Diffusivities in Multicomponent Systems // Processes. 2022. Vol. 10. 2042. DOI: 10.3390/pr10102042
73. Chen Q., Engström A., Ågren J. On Negative Diagonal Elements in the Diffusion Coefficient Matrix of Multicomponent Systems // Journal of Phase Equilibria and Diffusion. 2018. Vol. 39. P. 592–596. DOI: 10.1007/s11669-018-0648-x

### Сведения об авторах:

Повернов Сергей Евгеньевич (корр.), студ., Томский государственный университет (ТГУ), 634050, г. Томск, пр-т Ленина, д. 36; e-mail: sergey\_s\_00@mail.ru; ORCID: 0009-0008-1960-4548

Князева Анна Георгиевна, дфмн, проф., Институт физики прочности и материаловедения СО РАН (ИФПМ СО РАН), 634055, г. Томск, пр-т Академический, д. 2/4; e-mail: anna-knyazeva@mail.ru; ORCID: 0000-0002-9765-7695

### Research article

## Some coupled diffusion problems for ternary systems

S.E. Povernov<sup>1,2</sup>, A.G. Knyazeva<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

<sup>2</sup> Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russian Federation

Diffusion plays an important role in creating of new composite materials because it and accompanying phenomena participate in the formation of so-called transition layers. This paper presents possible boundary conditions for diffusion problems involving non-ideal contact between materials. A discontinuity in concentrations is also possible in the presence of ideal contact, due to differences in the mobilities of elements in different materials. Non-ideal contact leads to singularities in the boundary conditions, which may be due to various physical causes and leads to the concept of diffusion resistance at the boundary. It is shown that, within the framework of thermodynamics, the condition with an exponential dependence of the discontinuity in concentrations on temperature is substantiated. An algorithm for numerically solving the conjugate diffusive problem was developed based on component-wise separation of equations and an implicit second-order difference scheme, which is analogous to separation by physical processes. The boundary conditions were also approximated to second order using a Taylor series representation of the unknown quantities over small spatial steps (different for different regions) in the vicinity of the boundary. Using the problem of concentration redistribution between two materials as an example, the convergence of the algorithm and the consistency of the resulting concentration distributions at different points in time are illustrated. The parameters chosen for illustrations comply with thermodynamic constraints. Diffusion resistance at the interface between materials affects the concentration distribution and the rate at which equilibrium is established. Cross-diffusion coefficients do not alter the qualitative influence of imperfect contact on concentration redistribution. Such problems and the proposed algorithm can be useful in modeling the synthesis of composite materials, as well as in problems involving welding, soldering, and coating.

**Keywords:** multicomponent diffusion, implicit finite-difference scheme, concentration profiles, non-ideal contact

**Received:** 01.11.2025 / **Published online:** 25.02.2026

### Acknowledgements

The work was carried out in collaboration with the Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS under the Program for Basic Scientific Research FWRW–2022–0003.

### References

1. Geguzin Y.E. Diffuzionnaya zona. Moscow: Nauka, 1977. 343 p.

2. *Barah O.O., Natukunda F., Bori I., Ukagwu K.J.* Mechanisms and modelling of diffusion in solids: a multiscale framework with industrial case studies and AI enhancements. *Discover Sustainability*. 2025. Vol. 6. P. 804. DOI: 10.1007/s43621-025-01746-0
3. *Mehrer H.* Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes. Springer Berlin Heidelberg, 2007. 654 p. DOI: 10.1007/978-3-540-71488-0
4. *Wei Y., Zhu L., Li Y., Chen Y., Guo B.* Formation mechanism and microstructure evolution of Cu/Ti diffusion bonding interface and its influence on joint properties. *Vacuum*. 2023. Vol. 213. 112167. DOI: 10.1016/j.vacuum.2023.112167
5. *Wei S., Li Y., Zhang R., Chen H., Liang T., Yin W.* Microstructure and mechanical properties of Zr-W and Zr-Ta-W interface fabricated by hot isostatic pressing diffusion welding. *Journal of Nuclear Materials*. 2025. Vol. 606. 155627. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2025.155627
6. *Li G., Akbar A., Zhang L.-W., Rosei F., Liew K.M.* Surface modification strategy for controlling wettability and ionic diffusion behaviors of calcium silicate hydrate. *Applied Surface Science*. 2023. Vol. 622. 156993. DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.156993
7. *Zhao S., Zhu J., Yang Z., Zhu Y., Sun H., Zhao L.* Interface and crystallization evolution induced by reactive nitrogen and oxygen sputtering in Ni/Ti multilayer. *Surface and Coatings Technology*. 2023. Vol. 472. 129941. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2023.129941
8. *Bose S.* Oxidation- and Corrosion-Resistant Coatings. *High Temperature Coatings* / ed. by S. Bose. 2nd ed. Elsevier, 2018. P. 97–198. DOI: 10.1016/B978-0-12-804622-7.00006-1
9. *Cui Y., Zhao J., Zhao Y., Shao J.* Diffusion of metal ions from a substrate into oxide coatings. *Optical Materials Express*. 2016. Vol. 6, no. 10. P. 3119–3126. DOI: 10.1364/OME.6.003119
10. *Tret'yakov Y.D.* Tverdogaznyye reaktsii. Moscow: Khimiya, 1978. 360 p.
11. *Dybkov V.I.* Reaction Diffusion and Solid State Chemical Kinetics. Trans Tech Publications, 2010. 334 p. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSFo.67-68
12. *Reiss H.* Diffusion-Controlled Reactions in Solids. *Journal of Applied Physics*. 1959. Vol. 30. P. 1141–1152. DOI: 10.1063/1.1735284
13. *Katona G.L., Safonova N.Y., Ganss F., Mitin D., Vladymyrskiy I.A., Sidorenko S.I., Makogon I.N., Beddies G., Albrecht M., Beke D.L.* Diffusion and solid state reactions in Fe/Ag/Pt and FePt/Ag thin-film systems. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015. Vol. 48. 175001. DOI: 10.1088/0022-3727/48/17/175001
14. *Ding F., Wang Q., Liang C., Zhang Y.* Diffusion behavior and microstructural evolution of bonding interface between AuSn20 and tungsten-copper alloy. *Soldering & Surface Mount Technology*. 2025. Vol. 37, no. 5. P. 333–341. DOI: 10.1108/SSMT-11-2024-0066
15. *Wang Y., Huang Y., Liu W., Chen B., Liu J., Zhang L., Liu W., Ma Y.* Investigation of diffusion reaction mechanism between W20Ta solid solution and Ni. *Materials Characterization*. 2023. Vol. 200. 112894. DOI: 10.1016/j.matchar.2023.112894
16. *Xu D., Chen P., Fu K., Sang C., Chen R., Hong T., Cheng J., Xu K.* Connection reinforcement design of ODS-W/Cu joint: Transforming immiscible interface into dual reaction diffusion interface. *Materials Characterization*. 2025. Vol. 228. 115402. DOI: 10.1016/j.matchar.2025.115402
17. *Ding Y., Wen D., Wang X., et al.* Interface Evolution and Mechanical Properties of Al/Ta Laminated Composites Fabricated by Vacuum-Embedded Diffusion Welding. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*. 2025. Vol. 133. 107302. DOI: 10.2139/ssrn.5239598
18. *Ma J., Xu W., Zheng C., Li Y., Feng X., Yang Y.* Effect of trace Al and Ti elements on borosilicate glass corrosion resistance of Inconel 690 alloy. *Journal of Nuclear Materials*. 2025. Vol. 606. 155626. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2025.155626
19. *Straumal A.B., Mazilkin I.A., Tsoi K.V., Baretzky B., Straumal B.B.* "Wetting" Phase Transitions by the Second Solid Phase for Linear Defects (Grain Boundary Triple Junctions). *JETP Letters*. 2020. Vol. 112. P. 257–261. DOI: 10.1134/S0021364020160031
20. *Bokshcheyn B.S., Yaroslavtsev A.B.* Diffuziya atomov i ionov v tverdykh telakh. Moscow: MISiS, 2005. 362 p.
21. *Voroshnin L.G., Vityaz' P.A., Nasybulin A.K.H., Khusid B.M.* Mnogokomponentnaya diffuziya v geterogennykh splavakh. Minsk: Vysheyschaya shkola, 1984. 142 p.
22. *De Groot S.R., Mazur P.* Non-Equilibrium Thermodynamics. North-Holland Publishing Company, 1962. 510 p.
23. *Gurov K.P., Kartashkin B.A., Ugaste Y.E.* Vzaimnaya diffuziya v mnogofaznykh metallicheskih sistemakh. Moscow: Nauka, 1981. 350 p.
24. *Gurov K.P.* Fenomenologicheskaya termodinamika neobratimyykh protsessov. Moscow: Nauka, 1978. 128 p.
25. *Gyarmati I.* Non-equilibrium thermodynamics: Field theory and variational principles. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1970. 184 p.
26. *Knyazeva A.G.* Cross Effects in Solid Media with Diffusion. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 2003. Vol. 44. P. 373–384. DOI: 10.1023/A:1023485224031
27. *Knyazeva A.G.* Diffuziya i reologiya v lokal'no-ravnesnoy termodinamike. *Bulletin of Perm State Technical University. Mathematical Modeling of Systems and Processes*. 2005. No. 13. P. 45–60.
28. *Knyazeva A.G.* Nonlinear models of deformable media with diffusion. *Physical mesomechanics*. 2011. Vol. 14, no. 6. P. 35–51.

29. Knyazeva A.G., Demidov V.N. Factors of carrying over for the three-componental deformable alloy. PSTU Mechanics Bulletin. 2011. No. 3. P. 84–99.
30. Knyazeva A.G. Thermodynamic generalization of the theory of thermoelastic diffusion for a medium with changing density. PNRPU Mechanics Bulletin. 2025. No. 3. P. 101–113. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.3.09
31. Mikolaychuk M.A., Knyazeva A.G. Model' diffuzii primesi v strukturno-neodnorodnoy deformiruyemoy srede. Russian Physics Journal. 2012. Vol. 55, no. 5–2. P. 74–80.
32. Mikolaychuk M.A., Knyazeva A.G., Grabovetskaya G.P., Mishin I.P. Research of the stress influence on the diffusion in the coating plate. PNRPU Mechanics Bulletin. 2012. No. 3. P. 120–134.
33. Mikolaichuk M.A., Knyazeva A.G. Effect of stresses and strains on impurity redistribution in a plate under uniaxial loading. Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2010. Vol. 51. P. 422–430. DOI: 10.1007/s10808-010-0057-3
34. Knyazeva A.G., Mikolaychuk M.A. Saturation of a plate with an environmental impurity under mechanical loading conditions. Mechanics of Solids. 2011. Vol. 46. P. 692–704. DOI: 10.3103/S0025654411050050
35. Zhang J., Zhao Q., Zhang L., Wang J., Sun C. Molecular dynamics simulations based on the diffusion interface of solid-phase Ti–Al system. Chemical Physics. 2025. Vol. 597. 112797. DOI: 10.1016/j.chemphys.2025.112797
36. Fan S., Peng M., Duan Y., Yu Q., Zhou X., Bu H., Li J., Yang Z., Li M. Molecular dynamics simulation of diffusion mechanisms of Al–Mg interface. Physica B: Condensed Matter. 2025. Vol. 715. 417620. DOI: 10.1016/j.physb.2025.417620
37. Zvyagintseva A.V. Mathematical modeling of hydrogen diffusion in a medium with impurity and structural traps in the conditions of the formation and decomposition of hydrogen-containing complexes. International Journal of Hydrogen Energy. 2025. Vol. 101. P. 112–119. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.12.047
38. Akimova E.N., Gorbachev I.I., Popov V.V. Solving the multicomponent diffusion problems by parallel matrix sweep algorithm. Mathematical Models and Computer Simulations. 2005. Vol. 17, no. 9. P. 85–92.
39. Chen L.-Q., Zhao Y. From classical thermodynamics to phase-field method. Progress in Materials Science. 2022. Vol. 124. 100868. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2021.100868
40. Mathew C.C., Song J., Adu-Gyamfi E., Fu Y. Phase field numerical model for simulating the diffusion controlled stress corrosion cracking phenomena in anisotropic material. Computational Materials Science. 2025. Vol. 247. 113528. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113528
41. Ngiam Y., Cao Z.H., Huang M.X. Understanding hydrogen embrittlement in press-hardened steel by coupling phase field and hydrogen diffusion modeling. Materials Science and Engineering: A. 2022. Vol. 834. P. 142523. DOI: 10.1016/j.msea.2021.142523
42. Chen Q., Ma N., Wu K., Wang Y. Quantitative phase field modeling of diffusion-controlled precipitate growth and dissolution in Ti–Al–V. Scripta Materialia. 2004. Vol. 50, no. 4. P. 471–476. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2003.10.032
43. Wu X.-W., Chen M., Ke L.-L. An electro-thermo-mechanical coupling phase-field model of defect evolution induced by electromigration in interconnects. International Journal of Mechanical Sciences. 2025. Vol. 285. 109792. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2024.109792
44. Jacobsson E., Hallberg H., Hektor J., Ristinmaa M. Modelling diffusive phase transformations in multiphase systems using the Voronoi implicit interface method. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2025. Vol. 33. 025006. DOI: 10.1088/1361-651X/ada818
45. Kainuma R., Ichinose M., Ohnuma I., Ishida K. Formation of  $\gamma'/\beta$  interface morphologies in Ni–Al–X ternary diffusion couples. Materials Science and Engineering: A. 2001. Vol. 312. P. 168–175. DOI: 10.1016/S0921-5093(00)01873-6
46. Brechet Y., Kirkaldy J.S. Parabolic periodic solutions of precipitation-modified ternary diffusion equations. Canadian Journal of Physics. 1992. Vol. 70. P. 193–198. DOI: 10.1139/p92-033
47. Kulkarni K.N. Analytical solution for interdiffusion in multicomponent systems and its application in high entropy alloys. AIP Advances. 2021. Vol. 11. 015116. DOI: 10.1063/5.0032837
48. Knyazeva A.G., Savitskii A.P. Estimate of volume changes in the diffusion zone. I. Isothermal interaction of two semi-infinite media. Russian Physics Journal. 1997. Vol. 40. P. 420–427. DOI: 10.1007/BF02508770
49. Knyazeva A.G., Savitskii A.P. Estimating volume changes in the diffusion zone. 2. Interaction of two finite media. Russian Physics Journal. 1997. Vol. 40. P. 546–553. DOI: 10.1007/BF02766386
50. Mohanty R.R., Sohn Y. Phase-field investigation of multicomponent diffusion in single-phase and two-phase diffusion couples. Journal of Phase Equilibria and Diffusion. 2006. Vol. 27, no. 6. P. 676–683. DOI: 10.1007/BF02736572
51. Morino T., Ode M., Hirose S. Direct CALPHAD coupling phase-field model: Closed-form expression for interface composition satisfying equal diffusion potential condition. Physical Review E. 2024. Vol. 109. 065303. DOI: 10.1103/PhysRevE.109.065303
52. Knyazeva A.G. Some diffusion problems involved in analyzing the properties of coatings. Physical Mesomechanics. 2001. Vol. 4, no. 1. P. 49–65.
53. Butov V.G., Gubarkov D.V., Knyazeva A.G. Distribution of the diffusing element concentration in a three-layered system and estimation of the diffusion coefficient based on the solution of an inverse problem. Physical Mesomechanics. 2000. Vol. 3, no. 6. P. 105–112.
54. Knyazeva A.G., Pobol I.L., Romanova V.A. Stress field in the diffusion zone of an electron-beam brazed joint. Physical Mesomechanics. 2001. Vol. 4, no. 5. P. 41–53.

55. *Knyazeva A.G., Anisimova M.A., Korosteleva E.N.* Features of diffusion-controlled processes of regulated volumetric synthesis from powder mixtures Ti-Al-Fe-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. PNRPU Mechanics Bulletin. 2022. No. 3. P. 125–134. DOI: 10.15593/perm.mech/2022.3.13
56. *Knyazeva A.G., Pobol' I.L., Oleshuk I.G.* Pereraspredeleniye legiruyushchikh elementov mezhdru soyedinyayemyimi materialami v usloviyakh izotermicheskoy payki i soputstvuyushchiye mekhanicheskiye napryazheniya. Russian Physics Journal. 2013. Vol. 56, no. 7–2. P. 14–24.
57. *Vendin S.V.* To the solution of issues of nonstationary diffusion in layered environments. Bulletin of BSTU named after V.G. Shukhov. 2019. No. 3. P. 100–105. DOI: 10.34031/article\_5ca1f6340f3497.49776836
58. *Popov V.M.* Teploobmen v zone kontakta neraz'yemnykh soyedineniy. Moscow: Energiya, 1971. 216 p.
59. *Zhang H., Huang D., Zhang Y.* A peridynamic thermal contact model for heat conduction analysis of thermally imperfect interface and conductive crack. International Journal of Heat and Mass Transfer. 2025. Vol. 241. 126763. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.126763
60. *Ding W., Xue T., Zhang X.* A thermal-mechanical coupling modeling with imperfect interfaces: Transition from ballistic to diffusive heat transfer. Applied Mathematical Modelling. 2026. Vol. 150. 116361. DOI: 10.1016/j.apm.2025.116361
61. *Wang J., Xue T., Zhang X.* Time fractional-integer hybrid modeling for anomalous thermal contact problems. International Journal of Heat and Mass Transfer. 2025. Vol. 251. 127338. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127338
62. *Zheng H., Zhang L., Dong Q., Sun G.* Prediction of the effective diffusion coefficient on sulfate ions in heterogeneous concrete based on Mori-Tanaka scheme. Construction and Building Materials. 2024. Vol. 449. 138326. DOI: 10.1016/j.conbuilmat.2024.138326
63. *Wang R., Wang P., Bhatt S., et al.* Phase-field modeling of diffusion bonding in 316H stainless steel: Impact of processing conditions on grain morphology and bonding quality. Materials Science and Engineering: A. 2025. Vol. 945. 149051. DOI: 10.1016/j.msea.2025.149051
64. *Anisimova M.A., Knyazeva A.G., Korosteleva E.N., Povernov S.E.* Peculiarities of sintering CuO-Al and TiO<sub>2</sub>-Al powder compositions under conditions of controlled heating. Chemical Physics and Mesoscopics. 2024. Vol. 26, no. 4. P. 457–470. DOI: 10.62669/17270227.2024.4.38
65. *Paskonov V.M., Polezhayev V.I., Chudov L.A.* Chislennoye modelirovaniye protsessov teplo- i massoobmena. Moscow: Nauka, 1984. 288 p.
66. *Samarskiy A.A., Vabishchevich P.N.* Vychislitel'naya teploperedacha. Moscow: Editorial URSS, 2003. 784 p.
67. *Larikov L.N., Isaychev V.I.* Struktura i svoystva metallov i splavov. Diffuziya v metallakh i splavakh. Kiev: Naukova Dumka, 1987. 512 p.
68. *Toor H.L.* Solution of the linearized equations of multicomponent mass transfer: I. AIChE Journal. 1964. Vol. 10, no. 4. P. 448–455. DOI: 10.1002/aic.690100408
69. *Volpert A.I., Posvyanskii V.S.* On the positivity of solutions of multicomponent diffusion and chemical kinetics equations. Soviet Journal of Chemical Physics. 1984. Vol. 3, no. 8. P. 1200–1205.
70. *Wojewoda I., Lopez G.A., Zieba P., Mittemeijer E.I.* Diffusion processes in diffusion-soldered interconnections. Archives of Metallurgy and Materials. 2004. Vol. 49, no. 2. P. 277–291.
71. *Mincheva M., Siegel D.* Nonnegativity and positiveness of solutions to mass action reaction–diffusion systems. Journal of Mathematical Chemistry. 2007. Vol. 42. P. 1135–1145. DOI: 10.1007/s10910-007-9292-0
72. *Rios W.Q., Antunes B., Rodrigues A.E., Portugal I., Silva C.M.* Accurate Effective Diffusivities in Multicomponent Systems. Processes. 2022. Vol. 10. 2042. DOI: 10.3390/pr10102042
73. *Chen Q., Engström A., Ågren J.* On Negative Diagonal Elements in the Diffusion Coefficient Matrix of Multicomponent Systems. Journal of Phase Equilibria and Diffusion. 2018. Vol. 39. P. 592–596. DOI: 10.1007/s11669-018-0648-x