

Рибчаков Д.Є.

Інститут термоелектрики НАН та МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна,
e-mail: anatysh@gmail.com



Рибчаков Д.Є.

ВИКОРИСТАННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ ТЕХНОЛОГІЧНИХ РЕЖИМІВ ВИГОТОВЛЕННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ *Bi-Te* ОТРИМАНИХ МЕТОДОМ ВЕРТИКАЛЬНОЇ ЗОННОЇ ПЛАВКИ

У статті наводяться основні типи комп'ютерних моделей, які застосовуються для дослідження термоелектричних матеріалів. Наводиться опис фізичної та математичної моделей вирощування кристалів, та метод застосування моделей вирощування кристалів для оптимізації технології виготовлення термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te*, та термоелектричні параметри виготовлених термоелектричних матеріалів. Бібл. 5. Рис. 4.

Ключові слова: вертикальна зонна плавка, термоелектричний матеріал, комп'ютерна модель.

Вступ

У добу технологічного прогресу та високих вимог до ефективності виробництва, комп'ютерне моделювання стає незамінним інструментом для розробки та вдосконалення нових матеріалів і технологій. Однією з областей, де це особливо актуально, є виробництво термоелектричних матеріалів методом вертикальної зонної плавки, оскільки вказаний метод є основним в масовому виробництві термоелектричної продукції [1–2]. Переваги використання комп'ютерного моделювання в цьому контексті є очевидними і відчутними на кожному етапі процесу.

Актуальність роботи – полягає в впровадженні комп'ютерних методів в технологічні режими виготовлення термоелектричних матеріалів, що забезпечить скорочення матеріальних затрат та часу на процес покращення матеріалу.

Мета роботи – розробка комп'ютерного підходу для оптимізації технологічних режимів виготовлення термоелектричних матеріалів

Комп'ютерні моделі в термоелектриці

Основними типами моделей, які використовуються у дослідженнях термоелектричних матеріалів є:

- Кінетичні моделі: Ці моделі описують динаміку росту кристалів відповідно до законів фізичної хімії та теплопередачі. Вони враховують дифузійні процеси, масоперенос, теплопередачу тощо.

- Моделі флюксу: Ці моделі досліджують переміщення та взаємодію атомів або молекул у фазі розплаву, зокрема враховують флюкс реагентів та продуктів.
- Молекулярна динаміка: В цих моделях атоми чи молекули розглядаються окремо, і їхні рухи моделюються з використанням фізичних законів.
- Комп'ютерне моделювання переносу маси та тепла: Ці моделі описують взаємодію реагентів з поверхнею кристалу, дифузійні процеси, теплові потоки тощо.
- Моделі вирощування кристалів: Ці моделі вивчають ріст кристалів, враховуючи різні параметри процесу, такі як температура, швидкість росту, концентрація реагентів.

Опис комп'ютерної моделі

Використання комп'ютерних моделей вирощування кристалів є найбільш перспективним рішенням для оптимізації технологічного режиму вирощування термоелектричного матеріалу. Ці моделі враховують різні параметри та умови вирощування кристалу, такі як температура, швидкість росту, концентрація реагентів тощо. Вони базуються на фізичних принципах дифузії, теплопередачі та інших процесах, які відбуваються під час зонної плавки. Дані моделі можуть надати інформацію про те, як рухається фронт кристалізації, які фактори впливають на його форму та швидкість формування. Форма фронту кристалізації є одним з ключових параметрів, який впливає на якість отриманого термоелектричного матеріалу. Найбільш сприятливим для вирощування монокристалів з малою кількістю структурних дефектів є плоский фронт кристалізації, оскільки на опуклому у розплав або увігнутому у кристал фронті кристалізації випадкові кристалічні зародки (домішкові зародки) будуть рости сумісно з основним, а на плоскому фронті кристалізації формується рівномірний та стабільний ріст кристалів з мінімальною кількістю дефектів[3 – 5].

На основі фізичної моделі вертикальної зонної плавки була створена комп'ютерна модель для дослідження формування форми фронту кристалізації для знаходження оптимальних розмірів нагрівника під конкретний термоелектричний матеріал на основі *Bi-Te*. Фізична модель вертикальної зонної плавки представлена на рис. 1.

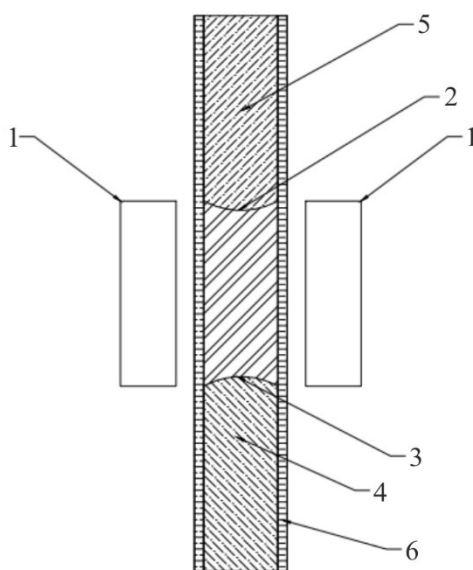


Рис. 1. Фізична модель: 1 – нагрівники, 2 – границя фронту розплаву, 3 – границя фронту кристалізації, 4 – матеріал в твердій фазі(монокристал), 5 – матеріал в твердій фазі(полікристал), 6 – кварцова ампула.

Комп'ютерна модель створена за допомогою програмного забезпечення Comsol Multiphysics. Вона являє собою класичну систему диференціальних рівнянь теплопровідності доповнену залежностями фізичних властивостей досліджуваного матеріалу. Побудована комп'ютерна модель дозволяє змінювати геометричні, температурні параметри і відстежувати формування фронту кристалізації. Результати моделювання залежності форми фронту кристалізації, термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te*, від висоти нагрівника циліндричної форми приведено на рис. 2. Це дозволило визначити що плоский фронт є повністю сформованим при співвідношенні $h = 2.25 d$ для даного складу термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te*. Для визначення впливу форми фронту кристалізації на параметри даного термоелектричного матеріалу на основі *Bi-Te* були виготовлені два злитка перший при співвідношенні $h = 2.25 d$, а другий $h = 1.5 d$. Термоелектричні параметри виготовленого матеріалу представлені на рис. 3, 4.

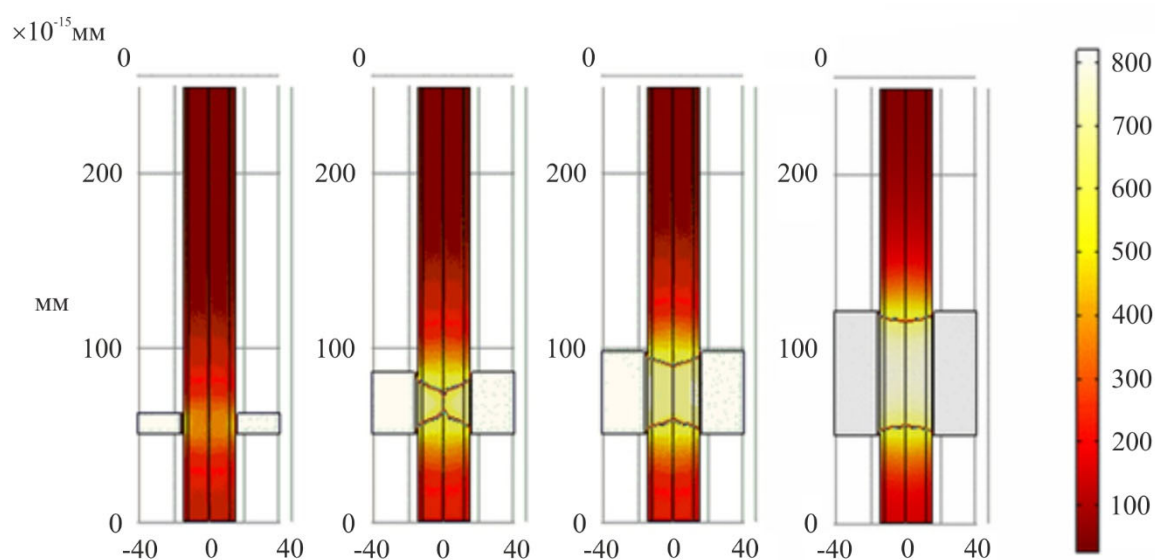
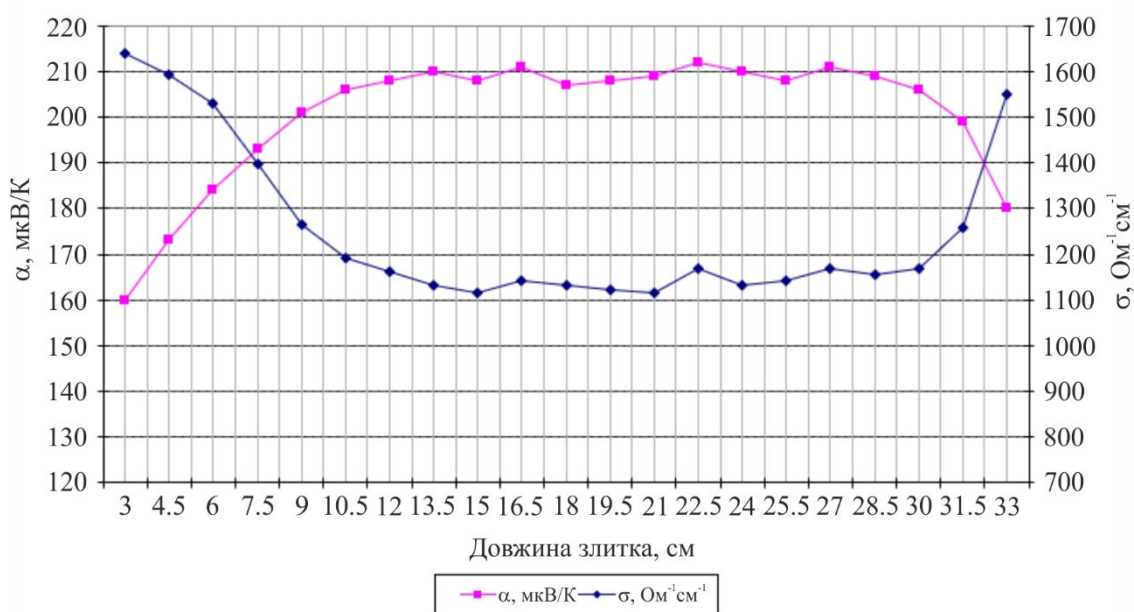
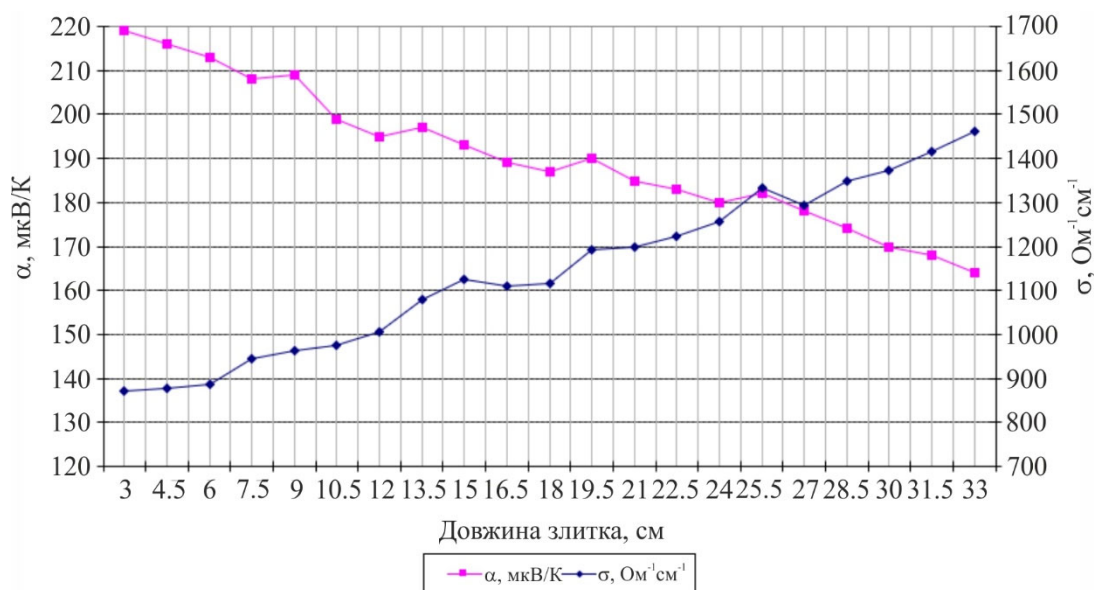


Рис. 2. Комп'ютерна модель зміни форми фронту кристалізації.

Рис. 3. Термоелектричні параметри, де $h = 2.25 d$.

Рис. 4. Термоелектричні параметри, де $h = 1.5 d$.

Як можна побачити з графіків плоский фронт кристалізації та відносно великий об'єм рідкої фази ($h = 2.25 d$) створюють однорідний матеріал з малою кількістю структурних дефектів по довжині всього злитку, в той час як матеріал отриманий при співвідношенні $h = 1.5 d$, характеризується неоднорідністю термоелектричних параметрів по довжині злитку. Оскільки в наш час є тенденція до збільшення об'ємів виробництва матеріалу шляхом збільшення діаметру ампул, відомі співвідношення вираховані в інших роботах не завжди зберігають свою актуальність. Саме тому доцільним є дослідження умов формування плоского фронту кристалізації, для кожного складу компонентів термоелектричного матеріалу, як підготовчий етап технологічного процесу, особливо це актуально при масовому виробництві термоелектричних матеріалів на підприємствах.

Слід зазначити, що залежно від складу компонентів, або при зміні технологічного устаткування може змінюватися і період формування плоского фронту кристалізації, що вимагатиме проведення додаткових досліджень для оптимізації нової технології та максимізації якості виготовленого термоелектричного матеріалу. Подібні дослідження зазвичай призводять до значних затрат часу та коштів на проведення експериментів, тому застосування подібних комп'ютерних моделей для оптимізації даного процесу дозволяє значно скоротити матеріальні затрати та час необхідні для оптимізації технології виготовлення.

Висновки

Використання комп'ютерного моделювання в виробництві термоелектричних матеріалів отриманих методом вертикальної зонної плавки дозволяє забезпечити більш швидкий, ефективний та інноваційний процес розробки та виготовлення. Це значно скорочую час та матеріальні затрати на експерименти та відкриває нові можливості для створення високоефективних матеріалів, які можуть знайти широке застосування у виробництві термоелектричних пристроїв та систем, що використовують відновлювальні джерела енергії та теплові потоки.

Автор виражає подяку академіку НАНУ Анатичуку Л.І. за надану тему досліджень.

Література

1. Enrique Maciá “Thermoelectric Materials: Advances and Applications”, CRC Press 05/2015, ISBN 9789814463522.
2. D.K.C. MacDonald, “Thermoelectricity: An Introduction to the Principles”, Dover Publications [Dover books on Physics], 2006, ISBN: 978-0486453040
3. Neubert M, Rudolph P. Progress in crystal growth and characterisation; 2001. p. 119 – 185.
4. Ніцович О.В. Дослідження умов формування плоского фронту кристалізації при вирощуванні термоелектричного матеріалу на основі Bi_2Te_3 методом вертикальної зонної плавки // Термоелектрика. – 2018. – №3. – С. 76 - 82.
5. Ніцович О.В. Комп'ютерне моделювання процесу кристалізації Bi_2Te_3 при наявності електричного струму // Термоелектрика. – 2018. – №5. – С. 12 - 21.

Надійшла до редакції: 27.02.2023.

Rybchakov D.E.

Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine, 1 Nauky str.,
Chernivtsi, 58029, Ukraine,
e-mail: anatykh@gmail.com

USE OF COMPUTER SIMULATION FOR OPTIMIZATION OF TECHNOLOGICAL MODES OF MANUFACTURING THERMOELECTRIC MATERIALS BASED ON *Bi-Te* OBTAINED BY VERTICAL ZONE MELTING METHOD

The article presents the main types of computer models used for the study of thermoelectric materials. A description of physical and mathematical models of crystal growth, and a method of using crystal growth models to optimize the technology of manufacturing thermoelectric material based on Bi-Te, and thermoelectric parameters of manufactured thermoelectric materials are given. Bibl. 5. Fig. 4.

Key words: vertical zone melting, thermoelectric material, computer model.

References

1. Enrique Maciá “Thermoelectric Materials: Advances and Applications”, CRC Press 05/2015, ISBN 9789814463522.
2. D.K.C. MacDonald, “Thermoelectricity: An Introduction to the Principles”, Dover Publications [Dover books on Physics], 2006, ISBN: 978-0486453040
3. Neubert M, Rudolph P. Progress in crystal growth and characterisation; 2001. p. 119 – 185.
4. Nitsovich O.V. (2018). Research on the conditions of forming a flat crystallization front when growing Bi_2Te_3 based thermoelectric material by vertical zone melting method. *J. Thermoelectricity*, 3, 76 – 82.
5. Nitsovich O.V. (2018). Computer simulation of Bi_2Te_3 crystallization process in the presence of electrical current. *J. Thermoelectricity*, 5, 12 – 21.

Submitted: 27.02.2023.