

УДК 53.082

Лисько В.В. канд. фіз.-мат. наук^{1,2}
Тудорой П.Ф.¹

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

²Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 2, Чернівці, 58012, Україна

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЕКСТРУЗІЇ СТРІЧКОВИХ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ Bi_2Te_3

Оскільки в процесі гарячої екструзії термоелектричних матеріалів у вигляді стрічкових структур заготовки матеріалу деформуються в практично ідеальних пластичних умовах, при оптимізації обладнання для отримання таких матеріалів може бути використано наближення в'язкої рідини. Це дозволяє проводити комп'ютерне моделювання процесу екструзії з використанням теорії гідродинаміки, де матеріал розглядається як рідина з дуже високою в'язкістю, яка залежить від швидкості і температури. У роботі наведено результати об'єктно-орієнтованого комп'ютерного моделювання процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi_2Te_3 . Розглянуті випадки отримання термоелектричних матеріалів у вигляді стрічкових структур для різних конфігурацій матриці. Отримано розподіли температури та швидкості протікання матеріалу у матриці, а також поля швидкостей матеріалу на виході з матриці, які безпосередньо впливають на структуру отриманого матеріалу та його термоелектричні властивості. Бібл. 6, рис. 5, табл. 1.

Ключові слова: моделювання, екструзія, стрічковий термоелектричний матеріал.

Вступ

На даний час для виробництва термоелектричної продукції поряд з монокристалічними термоелектричними матеріалами на основі $Bi-Te$ використовуються також і екструговані [1 – 3]. Основна перевага методу екструзії пов'язана з поліпшенням міцності матеріалів. При цьому їх термоелектричні властивості можуть залишатися на рівні властивостей матеріалів, отриманих кристалізацією з розплаву.

Зазвичай екструговані термоелектричні матеріали виготовляються у вигляді циліндричних зразків діаметром до 25-30 мм. Використання екстругованих термоелектричних матеріалів у вигляді стрічкових структур для виробництва стандартних модулів може забезпечити зменшення їх собівартості за рахунок істотного зменшення втрат матеріалу.

При цьому при створенні обладнання для отримання екстругованих матеріалів у вигляді стрічкових структур необхідними є проектування та оптимізація його конструкції.

Одним з ефективних способів вивчення впливу умов отримання матеріалу на його структуру є математичне моделювання процесу екструзії в поєднанні з експериментальними результатами структурних досліджень [4, 5].

Метою цієї роботи є створення комп'ютерної моделі процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi_2Te_3 для дослідження розподілів температури і швидкості

течії матеріалу в матриці прямокутної форми, які можуть бути основою оптимізації обладнання для отримання стрічкового екстругованого термоелектричного матеріалу.

Фізична, математична та комп'ютерна моделі

Для побудови комп'ютерної моделі процесу гарячої екструзії стрічкового термоелектричного матеріалу використано наближення в'язкої рідини та пакет прикладних програм об'єктно-орієнтованого моделювання Comsol Multiphysics [5, 6]. В моделі використовується теорія гідродинаміки, де матеріал розглядається як рідина з дуже високою в'язкістю, яка залежить від швидкості і температури. Внутрішнє тертя рухомих куль матеріалу служить в якості джерела тепла. Розроблена комп'ютерна модель дозволяє визначати розподіл механічних напружень в матриці за рахунок зовнішнього тиску і теплових навантажень.

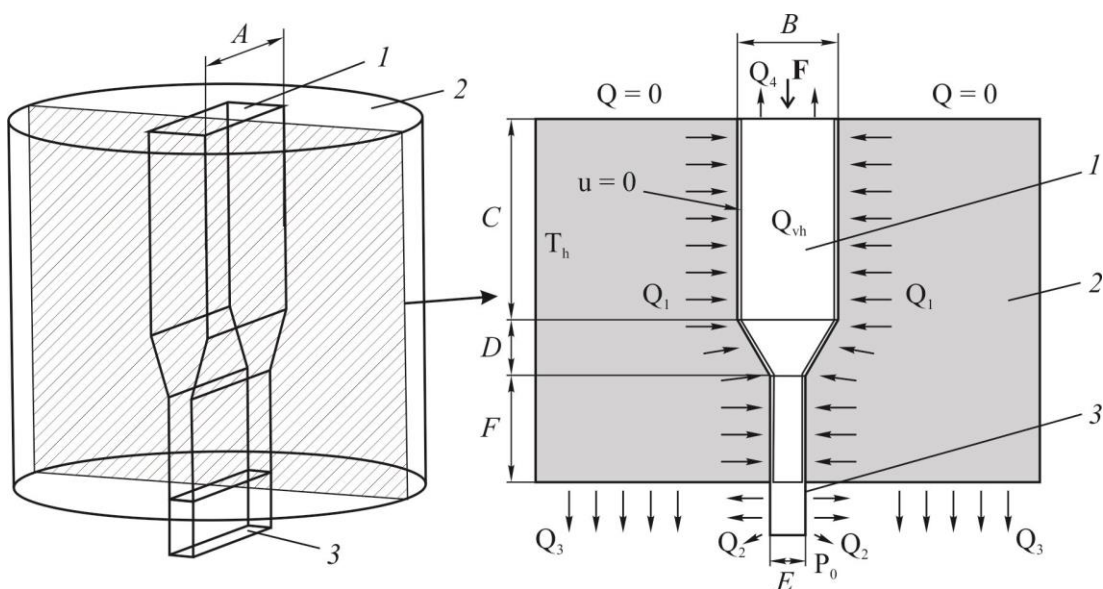


Рис. 1. Фізична модель процесу екструзії стрічкового термоелектричного матеріалу.
1 – заготовка термоелектричного матеріалу; 2 – матриця; 3 – стрічковий термоелектричний матеріал після виходу з матриці.

Використана фізична модель процесу екструзії стрічкового матеріалу наведена на рис. 1. У моделі розглядається стаціонарний випадок протікання через матрицю 2 заготовки матеріалу 1, отриманої холодним пресуванням. Геометричні розміри: A , B та C – ширина, товщина та довжина вхідного отвору матриці (заготовки термоелектричного матеріалу); D – довжина скошеної частини матриці; E , F – товщина та довжина вихідного отвору матриці, ширина якого рівна A .

Для знаходження розподілів швидкостей і температур, необхідно розв'язати наступну систему рівнянь [5]

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) &= \nabla \left[-p\mathbf{I} + \eta(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}\eta(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \right] + \mathbf{F}; \\ \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0; \\ \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + Q_{vh}; \\ Q_{vh} &= \eta(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} : \nabla \mathbf{u} \end{aligned} \quad (1)$$

з відповідними граничними умовами:

- термостатована бічна поверхня матриці: $T = T_h$,
- конвективний теплообмін бічної поверхні зразка після виходу з матриці:

$$-\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = h_2(T - T_0),$$

- відведення тепла елементами конструкції, що не показані на рис. 1, з нижньої частини матриці і верхньої частини заготовки термоелектричного матеріалу:

$$-\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = h_3(T - T_0), \quad -\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = h_4(T - T_0),$$

- теплова ізоляція верхньої частини матриці:

$$-\mathbf{n} \cdot (-\kappa \nabla T) = 0,$$

- вхідний тиск на заготовку: $p = p_1$,
- атмосферний тиск на виході зразка з матриці: $p = p_0 = 1 \text{ атм.}$,
- рівність нулю швидкості рідини на границі дотику з матрицею: $\mathbf{u} = 0$,
- рівність нулю перпендикулярної до бічної сторони зразка складової швидкості рідини після її виходу з матриці: $\mathbf{u}_n = 0$,

де: \mathbf{u} – поле швидкості, ρ – густина, p – тиск, η – коефіцієнт динамічної в'язкості, κ – теплопровідність, \mathbf{F} – векторне поле сил, Q_{vh} – об'ємне джерело тепла через внутрішнє тертя, \mathbf{I} – одинична матриця, $h_2 - h_4$ – коефіцієнти теплообміну, T_0 – температура оточуючого середовища.

Враховано нагрівання за рахунок внутрішнього тертя і контактний тепловий опір на границі дотику матеріалу і матриці. Властивості термоелектричного матеріалу і матеріалу матриці, використані при моделюванні, приведено в таблиці.

Таблиця

Властивості матеріалів

1.	Термоелектричний матеріал	Теплопровідність, Вт/(м*К)	4
		Густина, кг/ м ³	7600
		Теплоємність, Дж/(кг*К)	150
2.	Сталь (матриця)	Теплопровідність, Вт/(м*К)	24.3
		Густина, кг/ м ³	7850
		Теплоємність, Дж/(кг*К)	500

Еквівалентна в'язкість досліджуваної рідини та інші параметри, необхідні для комп'ютерної моделі, розраховуються за формулами, наведеними у роботі [6].

На рис. 2. наведена сітка методу скінчених елементів у Comsol Multiphysics для досліджуваної конфігурації матриці.

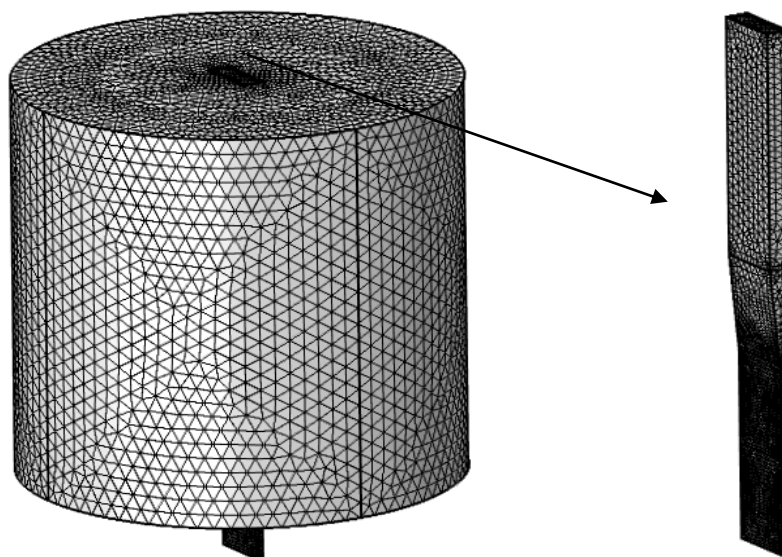


Рис. 2. Сітка скінчених елементів, побудована для конфігурації матриці, наведеної на рис. 1.

Результати комп'ютерного моделювання

Типові поля швидкостей і розподіли температури у матриці і термоелектричному матеріалі, отримані комп'ютерним моделюванням наведені на рис. 3, 4. Кольором позначена швидкість у мм / хв. і температура у градусах Цельсія.

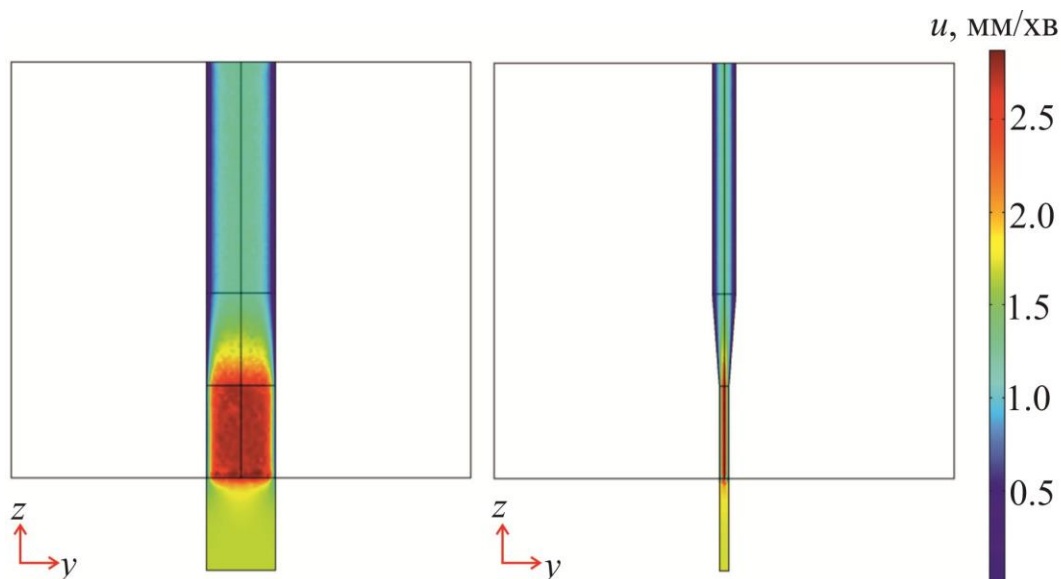


Рис. 3. Поле швидкості термоелектричного матеріалу всередині матриці та після виходу з неї (для матриці розмірами: $A = 15\text{ мм}$; $B = 5\text{ мм}$; $C = 50\text{ мм}$; $D = 20\text{ мм}$; $E = 2\text{ мм}$; $F = 20\text{ мм}$).

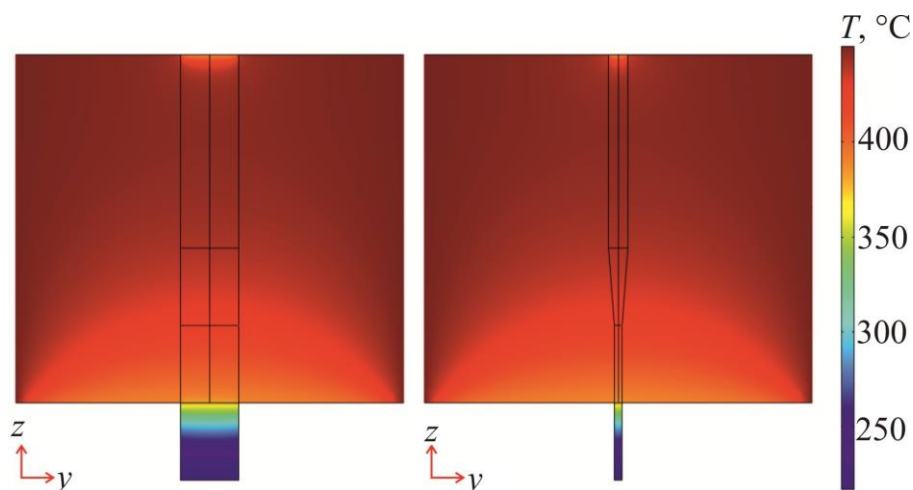


Рис. 3. Розподіли температур у термоелектричному матеріалі та матриці (для матриці розмірами: $A = 15$ мм; $B = 5$ мм; $C = 50$ мм; $D = 20$ мм; $E = 2$ мм; $F = 20$ мм).

На рис. 4 наведено поля швидкостей у термоелектричному матеріалі на виході з матриці, отримані для різної конфігурації матриці – розмірів її вхідного та вихідного отворів (вказаних на рисунку у мм).

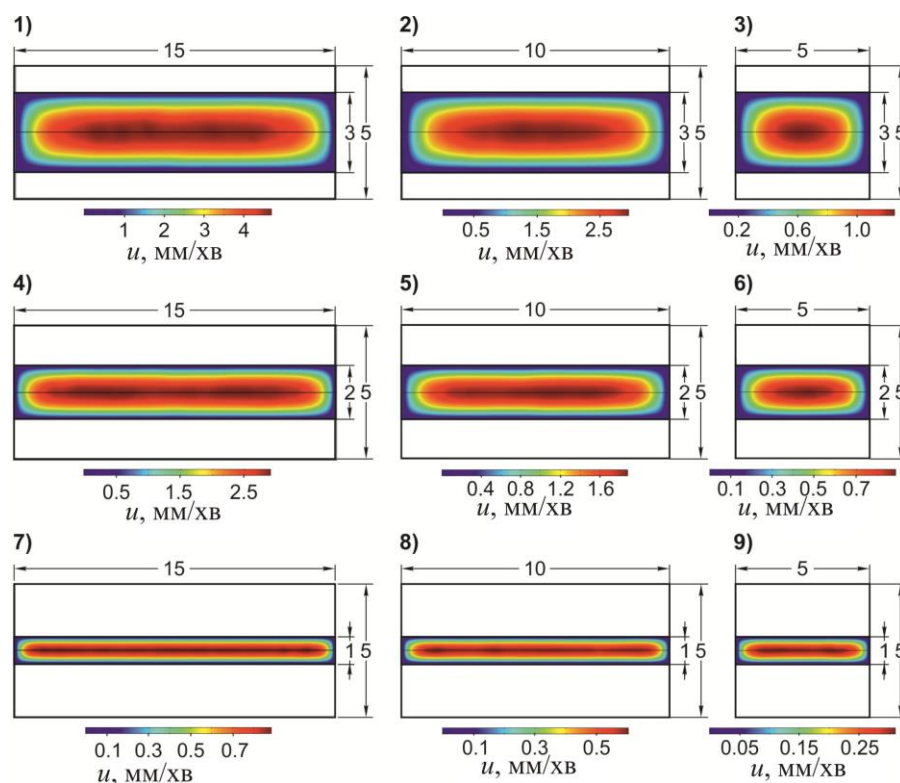


Рис. 4. Поля швидкостей у термоелектричному матеріалі на виході з матриці, отримані для різної конфігурації матриці. 1 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 2 – $A = 10$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 3 – $A = 5$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 4 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 2$ мм; 5 – $A = 10$ мм, $B = 5$ мм, $E = 2$ мм; 6 – $A = 5$ мм, $B = 5$ мм, $E = 2$ мм; 7 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 1$ мм; 8 – $A = 10$ мм, $B = 5$ мм, $E = 1$ мм; 9 – $A = 5$ мм, $B = 5$ мм, $E = 1$ мм.

На рис. 5 наведено розподіли швидкостей по ширині вихідного стрічкового термоелектричного матеріалу (через 1 мм після виходу з матриці). У відсотковому співвідношенні найменший розкид по швидкостях характерний для випадків з найбільшим співвідношенням товщин вхідного та вихідного отворів матриці.

Оскільки умови екструзії – форма фільтри, температура і швидкість деформації тощо – безпосередньо впливають на кінцеву структуру і властивості екстругованого матеріалу, отримана інформація є корисною для оптимізації конструкції обладнання для екструзії стрічкових матеріалів на основі *Bi-Te*. Розроблена комп'ютерна модель дозволяє також, при необхідності, відтворити ці результати для випадку інших матеріалів та умов екструзії.

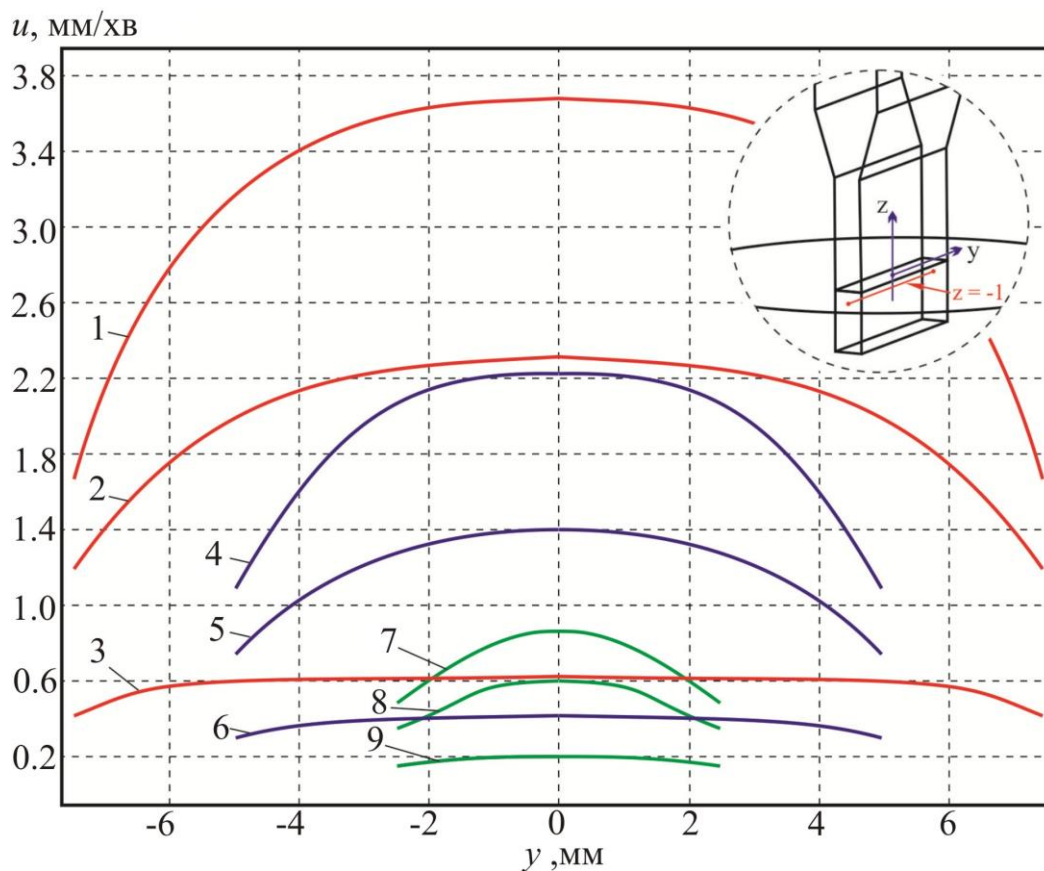


Рис. 5. Розподіли швидкостей по ширині вихідного стрічкового термоелектричного матеріалу (через 1 мм після виходу з матриці) для різної геометрії матриці.

1 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 2 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 2$ мм;

3 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 1$ мм; 4 – $A = 10$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм;

5 – $A = 10$ мм, $B = 5$ мм, $E = 2$ мм; 6 – $A = 10$ мм, $B = 5$ мм, $E = 1$ мм;

7 – $A = 5$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 8 – $A = 5$ мм, $B = 5$ мм, $E = 2$ мм;

9 – $A = 5$ мм, $B = 5$ мм, $E = 1$ мм.

Висновки

1. Створено комп'ютерну модель процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі *Bi₂Te₃*, яка може бути використана для дослідження розподілів температури і швидкості течії матеріалу в матриці, а також розподілу механічних напружень в матриці за рахунок зовнішнього тиску і теплових навантажень.

2. Отримано розподіли температури і швидкості течії матеріалу у матриці в залежності від конфігурації матриці для випадку екструзії термоелектричного матеріалу у вигляді стрічкових структур.
3. Отримано залежності розподілу швидкостей стрічкового термоелектричного матеріалу після виходу з матриці від співвідношення розмірів вхідного та вихідного отворів матриці. Визначено умови наближення цього розподілу до одномірного.

Література:

1. Булат, Л. П. Термоэлектрическое охлаждение. / Л. П. Булат – СПб. : СПбГУНиПТ, 2002. – 147 с.
2. Сабо, Е. П. Технология халькогенидных термоэлементов. Физические основы / Е. П. Сабо // Термоэлектричество. – 2006. – № 1. – С. 45—66.
3. Патент RU 2475333 С1. Способ экструзии термоэлектрического материала на основе халькогенидов висмута и сурьмы. А.И. Сорокин, Ю.Н. Пархоменко, В.Б. Освенский, М.Г. Лаврентьев, В.В. Каратаев, И.А. Драбкин. – Заявка от 19.09.2011.
4. Лаврентьев М.Г. Теоретическое и экспериментальное исследование формирования структуры термоэлектрического материала на основе твердых растворов $(\text{Bi}, \text{Sb})_2\text{Te}_3$, полученного методом горячей экструзии / М.Г. Лаврентьев, В.Б. Освенский, М.В. Меженный, А.И. Простомолотов, В.Т. Бублик, Н.Ю. Табачкова // XIII Межгосударственный Семинар “Термоэлектрики и их применения”. – Санкт-Петербург, Россия, 2012.
5. Лисько В.В. Наближення в'язкої рідини при моделюванні екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi_2Te_3 / В.В. Лисько // Термоелектрика. – 2019. – №1.
6. Fluid-Structure Interaction in Aluminum Extrusion // Structural Mechanics Module Model Library. – COMSOL AB, 2008. – p. 301-316.

Надійшла до редакції 24.04.2019

Лисько В.В., канд. физ. мат наук^{1,2}
Тудорой П.Ф.^{1,2}

¹Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины, ул. Науки, 1,
Черновцы, 58029, Украина, e-mail: anatysh@gmail.com;

²Черновицкий национальный университет
им. Юрия Федьковича, ул. Коцюбинского, 2,
Черновцы, 58012, Украина

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭКСТРУЗИИ ЛЕНТОЧНЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ Bi_2Te_3

Поскольку в процессе горячей экструзии термоэлектрических материалов в виде ленточных структур заготовки материала деформируются в практически идеально пластических условиях,

при оптимізації обладнання для отримання таких матеріалів може бути використано наближення в'язкої рідини. Це дозволяє проводити комп'ютерне моделювання процесу екструзії з використанням теорії гідродинаміки, де матеріал розглядається як рідина з дуже високою в'язкістю, яка залежить від швидкості і температури. В роботі наведено результати об'єктно-орієнтованого комп'ютерного моделювання процесу гарячої екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi_2Te_3 . Розглянуті випадки отримання термоелектричних матеріалів у вигляді ленточних структур для різних конфігурацій матриці. Отримані розподіли температури і швидкості протікання матеріалу в матриці, а також поля швидкостей матеріалу на виході з матриці, які безпосередньо впливають на структуру отриманого матеріалу і його термоелектричні властивості. Бібл. 6, рис. 6, табл. 1.

Ключевые слова: моделювання, екструзія, ленточний термоелектричний матеріал.

V.V. Lysko Candidate Phys.-math. Sciences^{1,2}
Tudoroi P.O.

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

²Yu.Fedkovych Chernivtsi National University, 2, Kotsiubynskyi str.,
Chernivtsi, 58012, Ukraine, e-mail: anatykh@gmail.com

COMPUTER SIMULATION OF EXTRUSION PROCESS OF Bi_2Te_3 BASED TAPE THERMOELECTRIC MATERIALS

As long as in the process of hot extrusion of thermoelectric materials in the form of tape structures, billets of material are deformed under practically perfect plastic conditions, when optimizing equipment to obtain such materials, viscous fluid approximation may be used. This allows a computer simulation of the extrusion process using the hydrodynamic theory, where material is regarded as a fluid with a very high viscosity, which is a function of velocity and temperature. This paper presents the results of an object-oriented computer simulation of the process of hot extrusion of Bi_2Te_3 based thermoelectric material. Cases of producing thermoelectric materials in the form of tape structures for various matrix configurations are considered. The distributions of temperature and flow velocity of material in the matrix are obtained, as well as material velocity fields at the exit from the matrix which directly affect the structure of resulting material and its thermoelectric properties.

Key words: simulation, extrusion, tape thermoelectric material.

References

1. Bulat L.P. (2002). *Thermoelectric cooling*. St.-Petersburg: St.-Petersburg State Academy of Cool and Food Technologies.
2. Sabo E.P. (2006). Technology of chalcogenide thermoelements. Physical fundamentals. *J. Thermoelectricity*, 1, 45-66.
3. Patent of RF 2475333 C1 (2011). Sorokin A.I., Parkhomenko Yu.N., Osvenskiy V.B., Lavrentiev M.G., Karataiev V.V., Drabkin I.A. Extrusion process of thermoelectric material based on bismuth and antimony chalcogenides [in Russian].
4. Lavrentiev M.G., Osvenskiy V.B., Mezhenyiy M.V., Prostomolotov A.I., Bublik V.T., Tabachkova N, Yu.

- (2012). Teoreticheskoie i eksperimentalnoie issledovaniie formirovaniia struktyry termoelektricheskogo materiala na osnove tverdykh rastvorov (Bi, Sb)₂Te₃ poluchennogo metodom goriachei ekstruzii [Theoretical and experimental research on the formation of structure of thermoelectric material based on (Bi, Sb)₂Te₃ solid solutions obtained by hot extrusion method. XIII Interstate Workshop “Thermoelectrics and Their Applications” (St.Petersburg, Russia, 2012).
5. Lysko V.V. (2019). Viscous fluid approximation when simulating Bi₂Te₃ based thermoelectric material extrusion process.
 6. Fluid-structure interaction in aluminum extrusion (2008). *Structural Mechanics Module Model Library*. COMSOL AB, p. 301-316.

Submitted 24.04.2019