

ТЕРМОЕЛЕКТРИКА

МІЖНАРОДНИЙ НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ

Заснований у грудні 1993 р.,
видається 6 разів на рік

№ 2

2019

Редакційна колегія

Головний редактор Л.І. АНАТИЧУК

Л.М. Вихор

Б.І. Стадник

В.В. Лисько

О.Я. Лусте

С.В. Мельничук

О.І. Рогачова

А.О. Снарський

Міжнародна редакційна рада

Л.І. Анатичук, *Україна*

А.І. Касіян, *Молдова*

С.П. Ашмонтас, *Литва*

Т. Кадзікава, *Японія*

Ж.К. Теденак, *Франція*

Т. Трітт, *США*

Х.Дж. Голдсмід, *Австралія*

С.О. Філін, *Польща*

Л. Чен, *Китай*

Д. Шарп, *США*

Т. Кайя, *США*

Ю.Г. Гуревич, *Мексика*

Ю. Грін, *Німеччина*

Засновники – Національна академія наук України,
Інститут термоелектрики Національної академії
наук та Міністерства освіти і науки України

Свідоцтво про державну реєстрацію – серія КВ № 15496-4068 ПР

Редактори

В.М. Крамар, П.В. Горський, О.Я. Лусте, Т.Г. Подбегаліна

Схвалено до друку Вченою радою Інституту термоелектрики
Національної академії наук та Міністерства освіти і науки України

Адреса редакції:

Україна, 58002, м. Чернівці, Головноштамт, а/с 86

Тел. : + (380-372) 90 31 65.

Факс : +(380-3722) 4 19 17

E-mail: jt@inst.cv.ua

<http://www.jt.inst.cv.ua>

Підписано до друку: 26.05.2019 Формат 70×108/16. Папір офсетний № 1. Друк
офсетний. Ум. друк. арк. 11.5. Обл.-вид. арк. 9.2. Наклад 400 прим. Замовлення 4.

Надруковано з оригінал-макету, виготовленого редакцією журналу «Термоелектрика»,
у типографії видавництва «Букрек»,
Україна, 58000, м. Чернівці, вул. Радищева, 10.

© Інститут термоелектрики Національної академії
наук та Міністерства освіти і науки України, 2019

ЗМІСТ

Загальні проблеми

- Риферт В.Г., Анатичук Л.І., Барабаш П.О., Усенко В.І., Стрикун А.П., Соломаха А.С., Петренко В.Г., Прибила А.В.* Еволюція системи відцентрової дистиляції з термоелектричним тепловим насосом для космічних місій. Частина 2. Дослідження змінних характеристик системи багатоступінчастої дистиляції (СМЕД) з термоелектричним тепловим насосом (ТТН) 5

Теорія

- Анатичук Л.І., Кобилянський Р.Р., Федорів Р.В.* Комп'ютерне моделювання процесу кріодеструкції шкіри людини при термоелектричному охолодженні 21
- Горський П.В., Мицкаюк Н.В.* Про температурні залежності термоелектричних характеристик перехідного шару термоелектричний матеріал-метал без урахування явища перколяції 36

Матеріалознавство

- Лисько В.В.Тудорой П.Ф.* Комп'ютерне моделювання процесу екструзії стрічкових термоелектричних матеріалів на основі Bi_2Te_3 61
- Анатичук Л.І. Ніцович О.В.* Комп'ютерне дослідження впливу ефекту Пельтьє на процес кристалізації термоелектричних матеріалів на основі Bi_2Te_3 70

Термоелектричні вироби

- Анатичук Л.І., Микитюк П.Д., Микитюк О.Ю.* Експериментальні дослідження термоелектричного джерела струму з кільцевою термоелектричною батареєю 79
- Прибила А.В.* Проектування термоелектричного модуля охолодження детектора рентгенівського випромінювання 87

Риферт В.Г., док. техн. наук¹
Анатичук Л.І., акад. НАН України^{2,3}
Барабаш П.О., канд. техн. наук¹
Усенко В.І., док. техн. наук¹
Соломаха А.С., канд. техн. наук¹
Петренко В.Г., канд. техн. наук¹
Прибила А.В., канд. фіз.-мат. наук^{2,3}
Стрикун А.П.¹

¹НТУ «КПІ», вул. Політехнічна, 6, Київ, 03056, Україна;

²Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна;
e-mail: anatyuch@gmail.com

³Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, 58000, Україна

ЕВОЛЮЦІЯ СИСТЕМИ ВІДЦЕНТРОВОЇ ДИСТИЛЯЦІЇ З ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИМ ТЕПЛОВИМ НАСОСОМ ДЛЯ КОСМІЧНИХ МІСІЙ

Частина 2. Дослідження змінних характеристик системи багатоступінчастої дистиляції (СМЕД) з термоелектричним тепловим насосом (ТТН)

У роботі наведено результати випробувань багатоступінчастого (5 ступенів) відцентрового дистилятора (СМЕД) з використанням для зниження енергоспоживання термоелектричного теплового насоса (ТТН). У досліджах вимірювали локальні (у режимі он-лайн) дані системи дистиляції, такі як температура рідин (вихідної й дистиляту) поточну продуктивність, загальний вміст солей, питому витрату енергії за різних швидкостей обертання ротора дистилятора, потужності ТТН, ступінь концентрування. Загальна тривалість випробувань склала понад 700 годин, кількість переробленої рідини (NaCl та урини) склала понад 2000 кг. Дослідження трьох дистиляторів і двох ТТН і порівняння їх результатів показало їхню ідентичність, що свідчить про високу якість виготовлення цих пристроїв. Отримані дані параметрів експлуатації (оберти n і потужність ТТН), можуть бути використані для оптимізації конструкції й режимів експлуатації роботи всієї системи СД + ТТН. Бібл. 28, рис. 8, табл. 1.

Ключові слова: термоелектрика, тепловий насос, дистилятор.

Вступ

В [1–7] наведено відомості про 3-х ступінчастий дистилятор з термоелектричним тепловим насосом. В [8–10] представлено результати розробки п'ятиступінчастого відцентрового дистилятора (СМЕД із ТТН) і його випробувань на стендах виготовлювача

дистилятора – «Термодистиляція Со», Україна, і Замовника – Honeywell, США. У наступні роки, а саме з 2002 по 2015 опубліковано декілька статей і доповідей [11–18] щодо випробувань CDS на стенді НАСА при концентруванні різних розчинів. Більш докладно ці результати, а також деякі методи поліпшення характеристик системи CDS наведено в статтях [19–26]. Більш докладний огляд робіт наведено у 1-й частині статті [27].

Опубліковані результати досить переконливо свідчать про унікальність системи для її використання в системі життєзабезпечення пілотованих кораблів у тривалих космічних польотах і на МКС (ISS). Однак у більшості публікацій наводились інтегральні характеристики роботи CDS – продуктивність системи G_d (по дистиляту), кг/год; питома витрата енергії SPC, Вт·год/кг; ступінь добування води з вихідної (що переробляється) рідини, %. Також наводились деякі показники якості одержуваної води.

Для створення теоретичної моделі CDS з метою подальшого її вдосконалення та оптимізації конструкції відцентрового дистилятора й системи в цілому наявних у опублікованій літературі даних недостатньо. Спроби моделювання CDS зроблені у праці [28]. Автори для розробки використовували без доведення їх придатності деякі залежності для розрахунків коефіцієнта тепловіддачі при конденсації та випаровуванні й не враховували температурну депресію, що виникає при випарюванні в дистиляторі вихідних розчинів. Крім того, при розрахунках теплопередачі не враховувався термічний опір стінки, що, як буде показано в 3 частині нашої статті, може становити до 30 % від загальної теплопередачі. Усе це призводить до спотворення таких важливих факторів в оцінці ефективності термоелектричного теплового насоса (ТТН), як різниця температур рідких потоків на вході в апарат Δt_{ex} і середніх температур рідин в апараті Δt_{cp} .

З даних, наведених у нашій доповіді [8], випливає, що при однакових швидкостях обертання ротора дистилятора зі зменшенням потужності ТТН спостерігається зниження питомої витрати енергії на CDS, що зазначено також у наших працях [19, 20]. Більш докладно вплив цього фактора на ефективність ТТН і величину SPC системи не вивчено.

Важливим параметром ефективності системи СМЕД + ТТН є також ступінь добування. Чим більше його величина, тем менша кількість залишку. У працях щодо тестових випробувань, опублікованих у період з 1990 по 2017 рр. немає критичного аналізу можливості досягнення максимального ступеня добування.

Експериментальний стенд для дослідження інтегральних показників СМЕД із ТНР.

Як ми вже відзначали, компанією «Термодистиляція Со» у період 2000 – 2007 рр було розроблено й виготовлено три ідентичних п'ятиступінчастих відцентрових дистилятори: перший з них в 2000 р., другий – в 2002 р., третій – в 2006 р. Також Інститутом термоелектрики НАН і МОН України (ІТЕ) було розроблено і виготовлено два ідентичних термоелектричних теплових насоси, які було передано компанії Honeywell International Inc. Ці апарати згодом випробовувались в різних варіантах на декількох стендах у США, у тому числі й на стенді NASA.

Перед відправленням у США апарати було випробувано на стенді компанії «Термодистиляція Со». Представлені тут результати випробувань дистиляторів і ТТН раніше не публікувалися.

На рис. 1 представлена принципова схема стенда, який використовувався компанією «Термодистиляція Со» для випробувань трьох дистиляторів і двох теплових насосів.

Основне й допоміжне устаткування стенда з'єднується системою трубопроводів, які

утворюють два циркуляційні контури. В одному з них, («гарячому») циркулює розчин, що випаровується, а в іншому («холодному») – дистилят.

Працює стенд у такий спосіб. Включається двигун дистилятора 1, який забезпечує задані оберти ротора дистилятора й вакуум-насосом 7 в апараті встановлюється необхідний тиск, який відповідає необхідній температурі кипіння розчину. З ємності 13 дистилятом заповнюється холодний контур, у якому забезпечується циркуляція дистиляту через конденсатор дистилятора 1, солемір 9, ротаметр 14, холодну сторону ТТН 2, теплообмінник-охолоджувач 3 і знову конденсатор дистилятора. «Гарячий» контур заповнюється з ємності 4 до рівня, що задається клапаном-регулятором 6. У гарячому контурі розчин циркулює з випарника дистилятора 1 через ротаметр 14, гарячу сторону ТТН 2 і знову у випарник дистилятора 1. При підведенні електроенергії до ТТН 2 відбувається охолодження конденсату в «холодному» контурі й нагрівання розчину в «гарячому» контурі. Розчин, перегрітий у ТТН 2 відносно температури насичення у випарнику ЦД 1, частково випаровується, а отримана пара, використовується в якості нагрівника у наступному ступені випару дистилятора, пара, отримана в останньому ступені дистилятора, конденсується в контактному конденсаторі ЦД 1. Надлишок дистиляту з холодного контуру автоматично відводиться в збірник дистиляту 5. Клапан 6 компенсує свіжим розчином випарену частину розчину, що циркулює в гарячому контурі. При цьому в ньому відбувається зростання концентрації розчинених речовин. У зв'язку з тим, що у ТТН 2 $Q_h = m_h \cdot c_{th} (t_2 - t_1) > Q_c = m_c \cdot c_{th} (t_4 - t_3)$, для забезпечення стаціонарності процесу надлишок тепла відводиться теплообмінником-охолоджувачем 3 в навколишнє середовище.

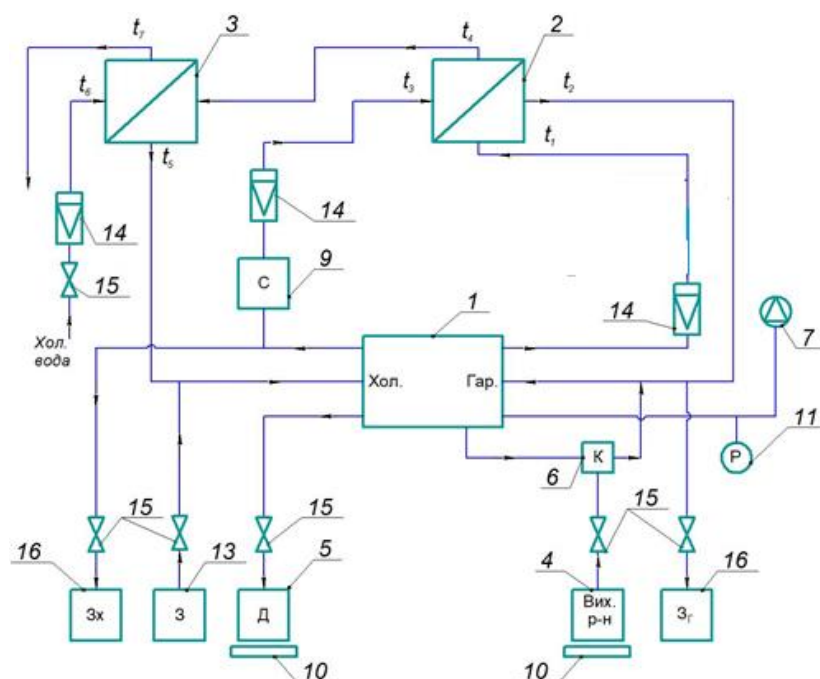


Рис. 1. Схема експериментального стенда

- 1 - відцентровий вакуумний дистилятор; 2 - термоелектричний тепловий насос;
- 3 - теплообмінник-охолоджувач; 4 - вихідний розчин; 5 - збірник дистиляту;
- 6 - клапан - регулятор живлення системи; 7 - вакуум-насос; 9 - солемір; 10 - електронні терези;
- 11 - вакуумметр; 13 - ємність із дистилятом для заправлення; 14 - ротаметри; 15 - запірний клапан;
- 16 - ємності для спорожнення контурів.

Після закінчення експерименту відключається електроживлення ТТН 2, а холодний і гарячий контури спорожнюються у відповідні ємності 16.

Температура вимірялася на вході й виході з термобатарей по гарячій (t_1, t_2) і холодній сторонах (t_3, t_4), після теплообмінника-охолоджувача в холодному контурі (t_5) і на вході й виході з теплообмінника-охолоджувача зі сторони охолодження (t_6, t_7). Температури в гарячому й холодному контурах вимірялися хромель-копелевими термопарами, точність виміру становила $\pm 0.1^\circ\text{C}$.

Тиск в апараті вимірявся вакуумметром 11 зі шкалою виміру $-1 \dots 0$ бар (клас точності 1.0) у комплекті з барометром.

Маса отриманого дистиляту (продукту) і вихідного розчину вимірялася електронними вагами, точність виміру ± 2 г, діапазон виміру ± 10 кг.

Солевміст у холодному контурі вимірявся солеміром Hanna ($0 \dots 999$ ppm).

Потужність приводу двигуна й теплового насоса вимірялася на основі показань вольтметрів і амперметрів, клас точності 0,5. Оберти вимірялися тахометром з точністю ± 1 об/хв.

Розрахункові величини

Продуктивність у кілограмах у годину:

$$G_d = \Sigma G_d / \Delta t, \quad (1)$$

де ΣG_d – загальна маса отриманого дистиляту в ємності 13, обмірювана по вагах; Δt – інтервал часу виміру.

Споживана потужність у ватах для основних компонентів тестового виробу CDS:

$$W = W_{\text{ТНР}} + W_{\text{CD}}, \quad (2)$$

де $W_{\text{ТНР}}$ і W_{CD} – це відповідно середня потужність, споживана ТТН та CD за період часу від запуску дистилятора до зупинки дистилятора. Споживана енергія вакуумного насоса на цьому етапі не враховувалася

Питоме споживання енергії (SPC), ват-години на кілограм зробленої води:

$$\text{SPC} = W/G, \text{ Вт} \cdot \text{год}/\text{кг}. \quad (3)$$

Ступінь добування або recovery:

$$R = G_d / G_{in}, \quad (4)$$

де $G_{in} = \Sigma G_{in} / \Delta t$ – маса споживаного розчину за час проведення експерименту, розрахована по терезах у ємності 16.

Ефективність теплового насоса:

$$\text{COP} = Q_h / W_{\text{ТНР}}, \quad (5)$$

де $Q_h = G_h \cdot C_p (t_2 - t_1)$, Вт, G_h – витрата рідини (розчину) в гарячому контурі; C_p – середня ізобарна теплоємність розчину, кДж/(кг·К).

Результати випробувань.

У таблиці представлений типовий перелік вимірюваних основних показників при концентруванні урини.

Характерна таблиця вимірюваних значень (уріна, n = 1200 об/хв)

Таблиця

Час	Привод			ТНР			Маса		TDS мг/л	Потік		Продуктивність	SPC Вт год/кг	Температура			
	U	I	W	U	I	W	Вхідна	Вихідна		гар.	хол.			Вт год/кг	Гар. вх. ТНР	Гар. вих. ТНР	Хол. вх. ТНР
хв	В	А	Вт	В	А	Вт	г	г		л/год	л/год	кг/год		°С			
0	24.2	3.1	75.0	20.5	10.08	206.6	0	0	12	60	82	0.00	0.0	23.2	23.1	22.9	22.9
6	24.2	3.1	75.0	22.5	10.9	245.3	288	184	22	60	82	1.84	174.1	31.8	43.7	23.4	22.7
12	24.2	3.1	75.0	28.5	14.3	407.6	634	602	38	60	82	4.18	174.1	37.5	48.3	24.5	22.4
18	24.2	3.1	75.0	29.2	14	408.8	1122	1070	51	60	82	4.68	103.4	38.7	49.4	25.1	22.3
24	24.2	3.1	75.0	32	14.4	460.8	1584	1528	61	60	82	4.58	117.0	38.8	50.8	25.1	22.0
30	24.2	3.1	75.0	31.8	15.2	483.4	2078	2006	67	60	82	4.78	116.8	39.4	51.5	25.2	22.1
36	24.2	3.1	75.0	32.3	14.22	459.3	2592	2502	73	60	82	4.96	107.7	40.0	52.2	25.4	22.1
42	24.2	3.1	75.0	32.1	15.24	489.2	3110	3004	76	60	82	5.02	112.4	40.0	52.2	25.4	22.3
48	24.2	3.1	75.0	31.9	15.2	484.9	3628	3500	79	61	82	4.96	112.9	40.1	52.1	24.9	22.0
54	24.2	3.1	75.0	32.4	15.36	497.7	4136	3990	82	61	83	4.90	116.9	40.3	52.2	25.1	22.1
60	24.2	3.1	75.0	33	15.6	514.8	4656	4492	84	62	83	5.02	117.5	40.7	53.5	24.9	22.0
66	24.2	3.1	75.0	33.2	15.64	519.2	5182	5006	87	62	83	5.14	115.6	40.9	53.2	24.9	22.1
72	24.2	3.1	75.0	33.1	15.56	515.0	5702	5508	90	63	83	5.02	117.5	40.9	53.1	24.9	22.0
78	24.2	3.1	75.0	33	15.58	514.1	6220	6010	92	64	83	5.02	117.4	40.9	53.2	24.9	22.0
84	24.2	3.1	75.0	33.2	15.72	521.9	6740	6510	94	65	83	5.00	119.4	41.0	53.5	24.8	22.0
90	24.2	3.1	75.0	33.2	15.46	513.3	7250	7010	96	67	83	5.00	117.7	41.0	53.5	24.8	22.0
96	24.2	3.1	75.0	32.8	15.34	503.2	7755	7500	97	68	83	4.90	118.0	41.0	53.1	24.6	22.0
102	24.2	3.1	75.0	32.9	15.4	506.7	8175	8000	98	71	83	5.00	116.3	41.0	53.1	24.8	22.0
108	24.2	3.1	75.0	0	0	0.0	8280	8205	96	71	83						
Середнє	24.2	3	75.0			492.8	8280	8205	75			4.93	115.1				
Загальне																	

Параметр «продуктивність» стосується дистилятора, TDS – загальна кількість розчинених твердих речовин.

Ідентичність показників трьох моделей СМЕД із двома ТТН

На рис. 2 і 3 показано результати концентрування урини для трьох моделей дистиляторів за потужності теплового насоса $N = 400$ Вт і швидкості обертання 1200 об/хв протягом 60 хв. З рисунків видно, що продуктивність G_d і питоме споживання енергії SPC усіх трьох зразків відцентрових дистиляторів має близькі значення. Розбіжність даних за цими показниками при однаковому часі τ не перевищує 5 %.

Цей результат дозволяє нам надалі при аналізі результатів різних випробувань не вказувати номер дистилятора.

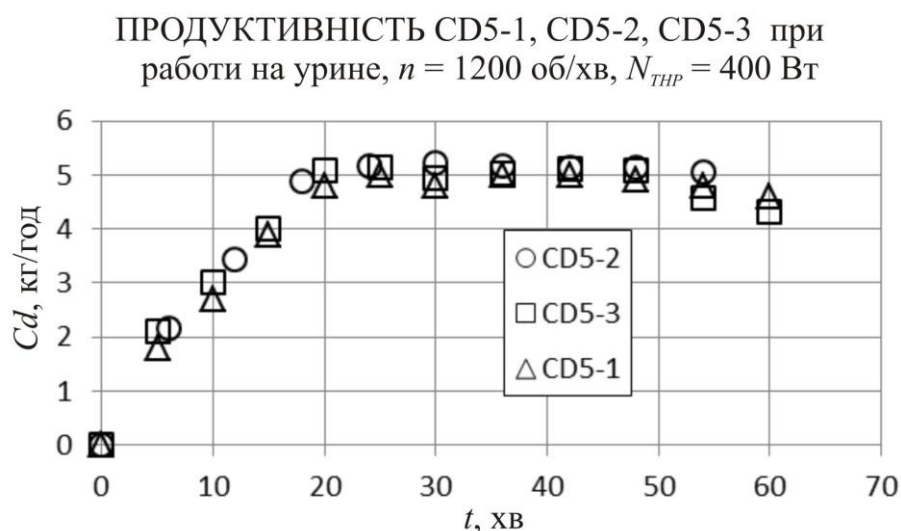


Рис. 2 Залежність продуктивності від часу для різних дистиляторів

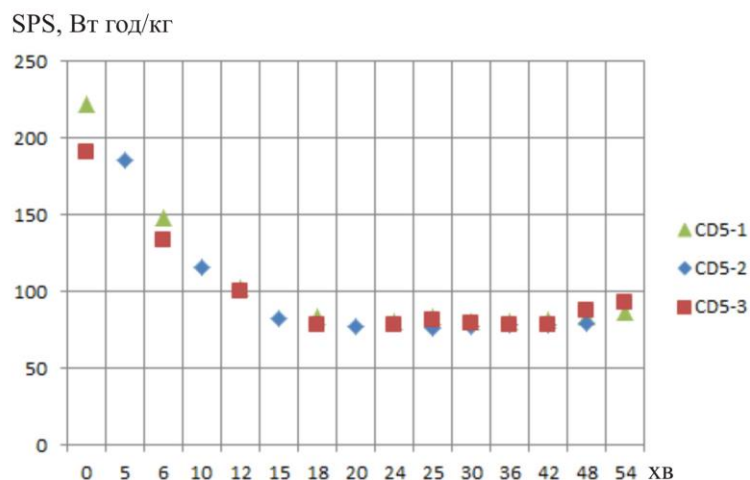


Рис. 3 Залежність питомого споживання енергії від часу для різних дистиляторів урини, $W = 400$ Вт (без врахування двигуна)

Ідентичність ТТН показана на рис.4, з якого випливає, що при роботі на одному зразку дистилятора CD5-3 з різними тепловими насосами ТТН-1 і ТТН-2 продуктивність при однаковій потужності теплових насосів ідентична.

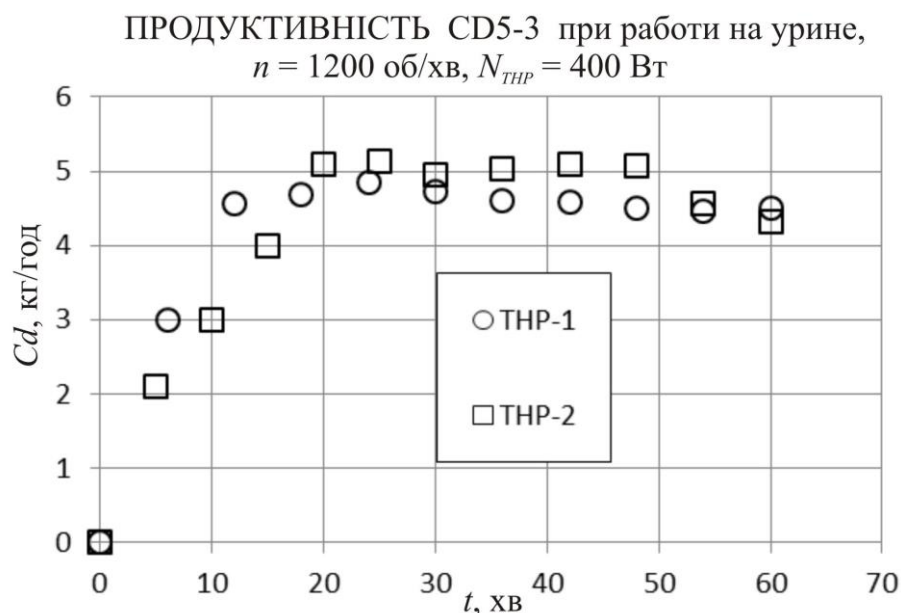


Рис.4. Залежність продуктивності системи від часу для двох зразків термоелектричних теплових насосів

Температури

На рис.5 показано зміну температур в он-лайн режимі при переробці урини з початковою концентрацією $C_0 = 5\%$, за швидкості обертання ротора $n = 1100$ об/хв та потужності теплового насоса $N_{ТНР} = 400$ Вт.

Після ввімкнення дистилятора через 10 хвилин температури рідин у гарячому й холодному контурах виходять на робоче значення.

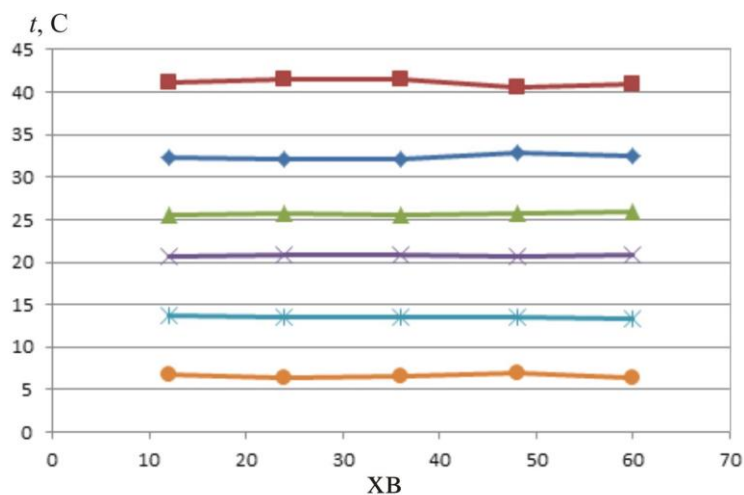


Рис. 5а Залежність температур від часу проведення експерименту (Вода)

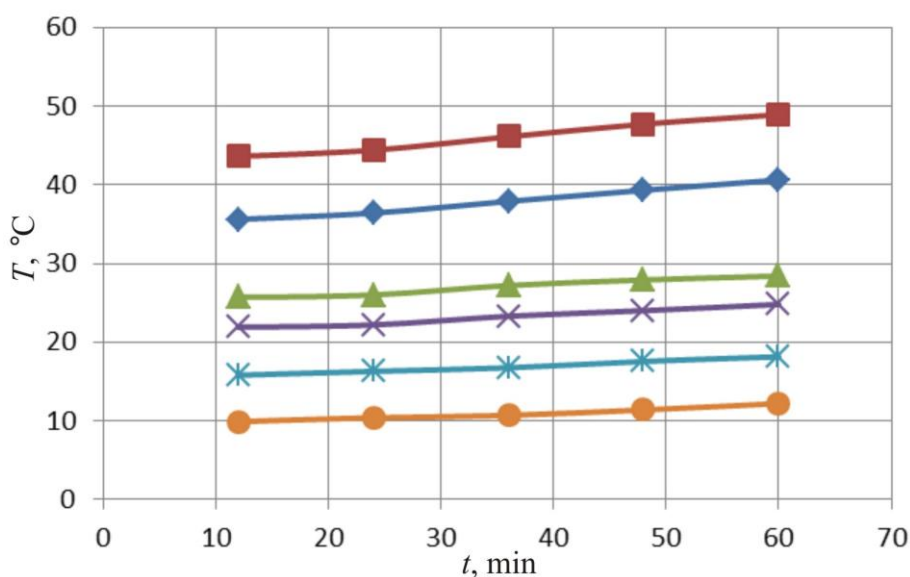


Рис. 5б Залежність температур від часу проведення експерименту (Урина)

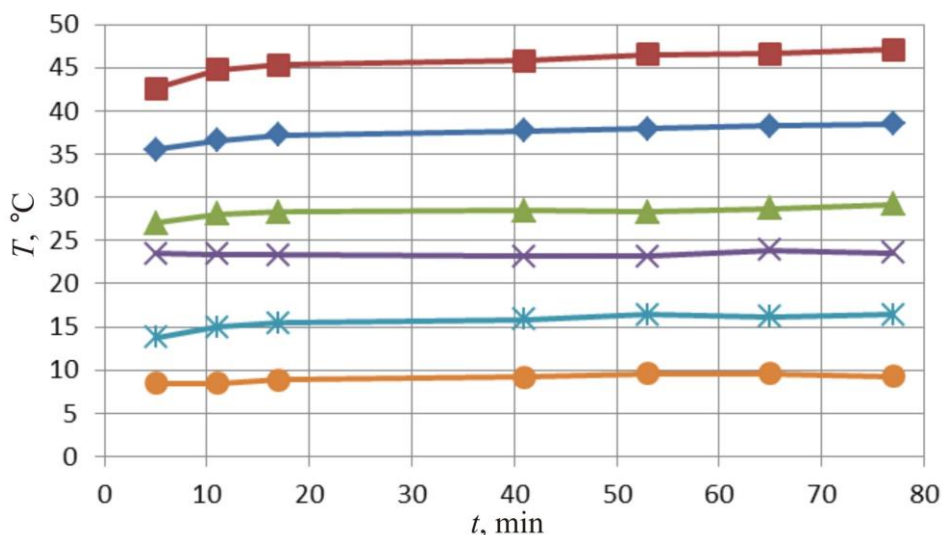


Рис. 5в Залежність температур від часу проведення експерименту (NaCl)

- ◆ hot-in температура розчину на вході в тепловий насос в «гарячому» контурі (t_1), °С;
- hot-out температура розчину на виході з теплового насоса в «гарячому» контурі (t_2), °С;
- ▲ cold-in температура дистиляту на вході в тепловий насос в «холодному» контурі (t_3), °С;
- ✕ cold-out температура дистиляту на виході з теплового насоса в «холодному» контурі (t_4), °С;
- * Δt* середній температурний напір на тепловому насосі, $\Delta t_{av} = 0,5(t_1 + t_2) - 0,5(t_3 + t_4)$, °С;
- Δt_in середній температурний напір на вході в тепловий насос, $\Delta t_{in} = t_1 - t_3$, °С;

При концентруванні розчину NaCl і урини температури в гарячому контурі ростуть протягом усього експерименту через збільшення в процесі випарювання фізико-хімічної температурної депресії. У свою чергу, це збільшує загальний середній температурний напір на

тепловому насосі (Δt_{av}) і середній температурний напір на вході в тепловий насос (Δt_m), що погіршує ефективність роботи теплового насоса.

Продуктивність

З рис.6 видно, що при концентруванні $NaCl$ і урини продуктивність менше, у порівнянні з отриманою при роботі на дистиляті й падає в процесі проведення експерименту через зростання температурної депресії.

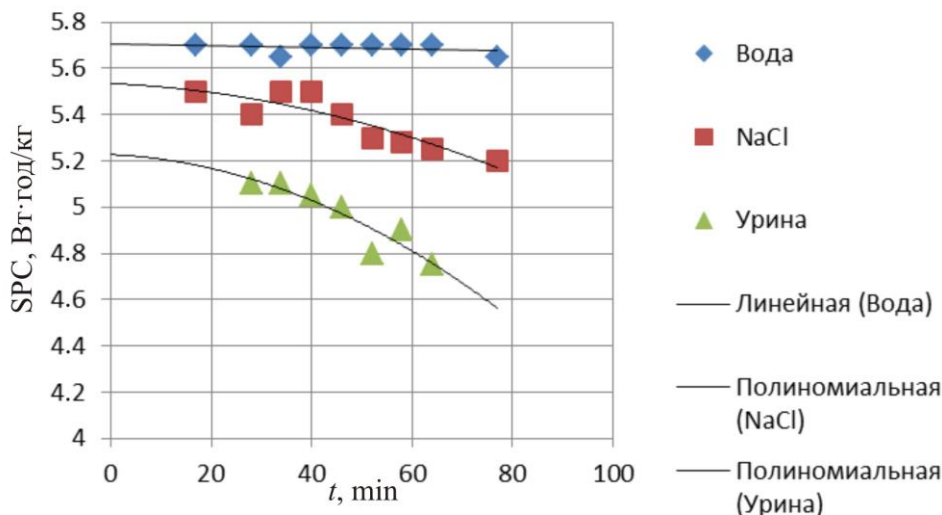


Рис.6 Продуктивність дистилятора залежно від виду розчину, який переробляється
($n = 1100$ про/хв; $N = 400$ Вт).

На рис. 7 показаний вплив потужності теплового насоса на продуктивність дистилятора. Досліди було виконано на урині при однаковій швидкості обертання ротора дистилятора ($n = 1000$ об/хв). Кількість отриманого дистиляту у всіх експериментах становила 5 кілограмів, що відповідало $recovery \approx 0.9$. Чим більше потужність теплового насоса, тем вище продуктивність системи. При цьому для кожної потужності в початкові 15 хв. іде зростання продуктивності (апарат виходить на робочий режим), після чого у зв'язку з ростом концентрації розчину в гарячому контурі росте температурна депресія й продуктивність падає. При цьому, чим вище потужність, тим більш сильний вплив на продуктивність справляє температурна депресія.

У той же час, як видно з малюнка 8, чим вище потужність, яка підводиться до теплового насоса, тем вище питома витрата енергії на одержання одного кілограма дистиляту. Таким чином, з енергетичної точки зору, ефективніше працювати при невеликих потужностях теплового насоса.

У всіх проведених випробуваннях якість отриманого дистиляту задовольняла всім вимогам, які висуваються до питної води. При переробці $NaCl$ TDS в «холодному» контурі не перевищував 10 ppm. При переробці урини TDS < 100 ppm; ХПК (хімічне споживання кисню) < 15 мг/л; зміст аміаку $NH_3 + NH_4$ < 5 мг/л.

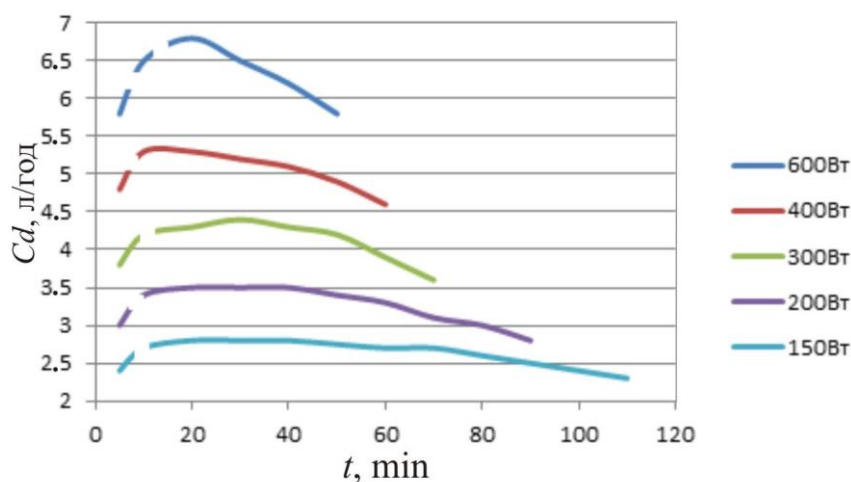


Рис. 7 Вплив потужності теплового насоса на продуктивність дистилятора ($n = 1000$ про/хв)

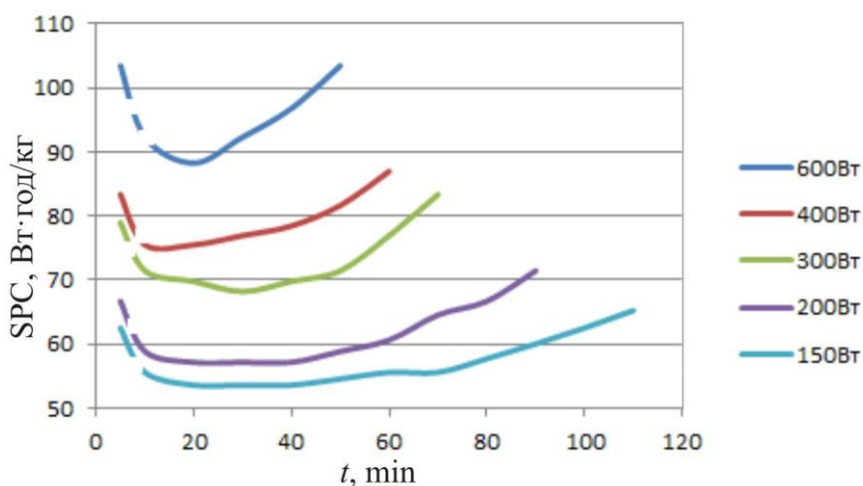


Рис. 8 Вплив потужності теплового насоса на питоме споживання енергії дистилятора без обліку потужності двигуна ($n = 1000$ про/хв)

Висновки

1. У даній роботі представлено результати вимірювання локальних (температура в контурах по «гарячій» і «холодній» сторонах, продуктивність, питоме споживання енергії, TDS) у режимі он-лайн при зміні часу тестування від 30 до 200 хв, швидкості обертання $n = 800 \dots 1200$ об/хв, $N_{\text{ТНР}} = 150 \dots 600$ Вт.
2. Показано ідентичність трьох виготовлених термодистиляторів СМЕД з 5 ступенями й 2 термоелектричних теплових насосів.
3. Відзначено зниження SPC при зменшенні $N_{\text{ТНР}}$ як локальних, тобто при певному значенні часу t , так і в середньому для концентрування урини й розчину NaCl при однакових значеннях швидкості обертання ротора і сумарній кількості отриманого дистиляту.
4. Виміряні у всіх тестах основні показники якості дистиляту, TDS, NH_4 , TOC відповідають вимогам до питної води.

Література

1. V.Rifert, P. Barabash, N.Goliad, "Methods and processes of thermal distillation of water solutions for closed water supply systems", SAE Paper 901249, 20th Intersociety Conference on Environmental Systems, Williamsburg, July 1990.
2. N.Samsonov, L.Bobe, V.Novikov, V.Rifert and others "Systems for water reclamation from humidity condensate and urine for space station", SAE Paper 941536, 24th International society Conference on Environmental Systems, June, 1994.
3. Samsonov, N.M., Bobe, L.S, Novikov, V., Rifert, V.G., Barabash, P.A et al., "Development of Urine Processor Distillation Hardware for Space Stations," SAE Paper 951605, the 25th International Conference on Environmental Systems, San Diego, July 1995.
4. Samsonov, N.M., Bobe, L.S, Novikov, V., Rifert, V.G., et al., "Updated systems for water recovery from humidity condensate and urine for the International space station" SAE Paper 972559, the 27th International Conference on Environmental Systems, Nevada, July 1997.
5. Samsonov, N.M., Bobe, L.S, Novikov, V., Rifert, V.G., et al., "Development and testing of a vacuum distillation subsystem for water reclamation from urine" SAE Paper 1999-01-1993, the 29th International Conference on Environmental Systems, 1999.
6. Rifert, V., V. Usenko, I. Zolotukhin, A. MacKnight, A. Lubman. Comparison Of Secondary Water Processors Using Distillation For Space Applications. - SAE Paper 99-70466, 29th International Conference on Environmental Systems, Denver, July 1999.
7. Rifert V, Stricun, A., Usenko, V. Study of dynamic and extreme performances of multistage centrifugal distiller with the thermoelectric heat pump. SAE Technical Papers 2000. 30th International Conference on Environmental Systems; Toulouse; France; 10-13 July 2000.
8. Rifert, V., V. Usenko, I. Zolotukhin, A. MacKnight and A. Lubman, "Design Optimisation of Cascade Rotary Distiller with the Heat Pump for Water Reclamation from Urine", SAE Paper 2001-01-2248, the 31st International Conference on Environmental Systems, Orlando, July 2001.
9. Rifert, V. G., V. I. Usenko, I. V. Zolotukhin, , A. MacKnight and A. Lubman, "Cascaded Distillation Technology for Water Processing in Space", SAE Paper 2003-01-2625. 34th International Conference on Environmental Systems. Orlando, July 2003.
10. Lubman A, MacKnight A, Rifert V, Zolotukhin I and Pickering K., "Wastewater Processing Cascade Distillation Subsystem. Design and Evaluation". SAE International, 2006-01-2273. July 2006.
11. A. Lubman, A. MacKnight, V.Rifert, and P. Barabash, "Cascade Distillation Subsystem Hardware Development for Verification Testing". SAE International, 2007-01-3177, July 2007.
12. M. Callahan, A. Lubman, A. MacKnight, H. Thomas, and K. Pickering, "Cascade Distillation Subsystem Development Testing". SAE International, 2008-01-2195, July 2008.
13. M. Callahan, A. Lubman, and K. Pickering, "Cascade Distillation Subsystem Development: Progress toward a Distillation Comparison Test". SAE International, 2009-01 -2401, July 2009.
14. M. Callahan, V. Patel, and K. Pickering, "Cascade Distillation Subsystem Development: Early Results from the Exploration Life Support Distillation Technology Comparison Test". American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2010-6149, July 2010.
15. Jeff McQuillan, Karen D. Pickering, Molly Anderson, Layne Carter, Michael Flynn, Michael Callahan, Leticia Vega, Rama Allada and Jannivine Yeh, "Distillation Technology Down-selection for the Exploration Life Support (ELS) Water Recovery Systems Element", the 40th International Conference on Environmental Systems, AIAA 2010-6125.

16. V.Patel, H.Au, S.Shull, M.Sargusingh, M.Callahan. Cascade distillation system – a water recovery system for deep space missions. ICES-2014-12, 44 International Conference on Environmental Systems, Tucson, Arizona, July 2014.
17. David Loeffelholz, Ben Baginski, Vipul Patel, Allen MacKnight, Sarah Schull, Miriam Sargusingh, Michael Callahan, “Unit Operation Performance Testing of Cascade Distillation Subsystem” 44th International Conference on Environmental Systems, 13-17 July 2014, Tucson. Arizona. ICES-2014-0014.
18. Michael R. Callahan, Miriam J. Sargusingh. Honeywell Cascade Distiller System Performance Testing Interim Results. American Institute of Aeronautics and Astronautics.
19. Риферт В.Г., Анатичук Л.И., Барабаш П.А., Усенко В.И., Стрикун А.П., Прибыла А.В. Улучшение методов дистиляции при использовании центробежных сил для регенерации воды во время космических полетов. // Термоэлектричество. – 2017. – №1. – С. 88 – 104.
20. Vladimir G. Rifert, Petr A. Barabash, Vladimir Usenko, Andrii S. Solomakha, Lukyan I. Anatychuk, A.V. Prybyla. Improvement the cascade distillation system for long-term space flights. 68th International Astronautical Congress (IAC), Adelaide, Australia, 25-29 September 2017. IAC-17-A1.P.25.
21. Анатичук Л.И., Прибыла А.В. Оптимизация тепловой коммутации в термоэлектрических тепловых насосах жидкость-жидкость для приборов очистки воды космического назначения // Термоэлектричество. – 2015. – №4. – С 41 – 47.
22. Анатичук Л.И., Прибыла А.В. Оптимизация системы питания термоэлектрического теплового насоса жидкость-жидкость // Термоэлектричество. – 2015. – №6. – С 59 – 64.
23. Анатичук Л.И., Розвер Ю.Ю., Прибыла А.В. Экспериментальное исследование термоэлектрического теплового насоса жидкость – жидкость // Термоэлектричество. – 2017. – №3. – С. 46 – 52.
24. Анатичук Л.И., Прибыла А.В. О предельных возможностях термоэлектрических тепловых насосов жидкость-жидкость // Термоэлектричество. – 2017. – №4. – С. 50 – 55.
25. Анатичук Л.И., Прибыла А.В. О влиянии качества теплообменников на свойства термоэлектрических тепловых насосов жидкость-жидкость // Термоэлектричество. – 2017. – №5. – С. 39 – 44.
26. Анатичук Л.И., Прибыла А.В. О холодильном коэффициенте термоэлектрических тепловых насосов жидкость-жидкость с учетом энергии на перемещение теплоносителя // Термоэлектричество. – 2017. – №6. – С. 34 – 40.
27. Риферт В.Г., Анатичук Л.И., Барабаш П.О., Усенко В.И., Стрикун А.П., Соломаха А. С., Петренко В. Г., Прибыла А. В. Эволюция системы центробежной дистиляции с термоэлектрическим тепловым насосом для космических миссий. Часть 1. Обзор публикаций по центробежной дистиляции в период 1990 – 2017 гг.
28. Bruce A. Perry, Molly S. Anderson. Improved dynamic modeling of the cascade distillation subsystem and analysis of factors affecting its performance. 45th International Conference on Environmental Systems 12-16 July 2015, Bellevue, Washington. ICES-2015-216.

Надійшла до редакції 30.04.2019

Риферт В.Г., док. техн. наук¹
Анатичук Л.И., акад. НАН України^{2,3}
Барабаш П.О., канд. техн. наук¹
Усенко В.И., док. техн. наук¹
Соломаха А. С. канд. техн. наук¹
Петренко В. Г канд. техн. наук¹
Прибыла А. В., канд. физ.-мат. наук^{2,3}
Стрикун А.П.¹

¹НТУ «КПИ», вул. Политехническая, 6,
Киев, 03056, Украина;

²Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины,
ул. Науки, 1, Черновцы, 58029, Украина,
e-mail: anatyck@gmail.com;

³Черновицкий национальный университет
им. Юрия Федьковича, ул. Коцюбинского, 2,
Черновцы, 58012, Украина

ЭВОЛЮЦИЯ СИСТЕМЫ ЦЕНТРОБЕЖНОЙ ДИСТИЛЛЯЦИИ С ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ТЕПЛОВЫМ НАСОСОМ ДЛЯ КОСМИЧЕСКИХ МИССИЙ

Часть 2. Исследование переменных характеристик системы многоступенчатой дистиляции (СМЕД) с термоэлектрическим тепловым насосом (ТНР)

В работе приведены результаты испытаний многоступенчатого (5 ступеней) центробежного дистилятора (СМЕД) с использованием для снижения энергопотребления термоэлектрического теплового насоса (ТНР). В опытах измеряли локальные (в режиме он-лайн) данные системы дистиляции, такие как температура жидкостей (исходной и дистилята), текущую производительность, общее солесодержание, удельный расход энергии при разных скоростях вращения ротора дистилятора, мощности ТНР, степень концентрирования. Общая продолжительность испытаний составила более 700 часов, количество переработанной жидкости (NaCl и урины) составило более 2000 кг. Исследование трех дистиляторов и двух ТНР и сравнение их результатов показало их идентичность, что характеризует высокое качество изготовления этих устройств. Полученные данные параметров эксплуатации (обороты n и мощность ТНР) могут быть использованы для оптимизации конструкции и режимов эксплуатации работы всей системы СД + ТНР. Библ. 28, рис. 8, табл. 1.

Ключевые слова: термоэлектричество, тепловой насос, дистилятор.

Rifert V.G., *doct. techn. sciences*¹
Anatychuk L.I., *acad. National Academy
of Sciences of Ukraine*^{2,3}
Barabash P.O., *cand. techn. sciences*¹,
Usenko V.I., *doct. of techn. sciences*¹
Solomakha A.S. ., *cand. of techn. sciences*¹
Petrenko V.G. *cand. of techn. sciences*¹
Prybyla A.V., *cand. phys. - math. sciences*^{2,3}
Strikun A.P.¹

¹NTU KPI, 6, Politekhnikeskaya str, Kyiv, 03056, Ukraine;

²Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1, Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine,
e-mail: anatych@gmail.com;

³Yu.Fedkovych Chernivtsi National University,
2, Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58000, Ukraine

EVOLUTION OF CENTRIFUGAL DISTILLATION SYSTEM WITH A THERMOELECTRIC HEAT PUMP FOR SPACE MISSIONS

Part 2. Study of the variable characteristics of a multi-stage distillation
system with a thermoelectric heat pump

The work presents the results of testing a multi-stage (5 stages) centrifugal distiller (CD) with the use of a thermoelectric heat pump (THP) to reduce power consumption. In the experiments, measurements were made of the local (online) data of distillation system, such as the temperature of the liquids (initial and distillate), current production, total salt content, specific power consumption at different speeds of distiller rotor, THP power, and the degree of concentration. The total duration of the tests was more than 700 hours, the amount of processed liquid (NaCl and urine) was more than 2000 kg. The study of three distillers and two THPs and a comparison of their results showed their identity, which characterizes high quality workmanship of these devices. The obtained operating parameters (revolutions n and THP power) can be used to optimize the design and operating modes of the entire CD + THP system. Bibl. 28, Fig. 8, Tabl. 1.

Key words: thermoelectricity, heat pump, distiller

References

1. Rifert V., Barabash P., Goliad N. (1990). Methods and processes of thermal distillation of water solutions for closed water supply systems. *SAE Paper 901249, 20th Intersociety Conference on Environmental Systems (Williamsburg, July 1990).*
2. Samsonov N., Bobe L., Novikov V., Rifert V., et al. (1994). Systems for water reclamation from humidity condensate and urine for space station. *SAE Paper 941536, 24th International society*

- Conference on Environmental Systems (June, 1994).*
3. Samsonov N.M., Bobe L.S, Novikov V., Rifert V.G., Barabash P.A, et al (1995). Development of urine processor distillation hardware for space stations. *SAE Paper 951605, 25th International Conference on Environmental Systems (San Diego, July 1995).*
 4. Samsonov, N.M., Bobe, L.S, Novikov, V., Rifert, V.G., et al. (1997). Updated systems for water recovery from humidity condensate and urine for the international space station. *SAE Paper 972559, 27th International Conference on Environmental Systems (Nevada, July 1997).*
 5. Samsonov N.M., Bobe L.S, Novikov V., Rifert V.G., et al. (1999). Development and testing of a vacuum distillation subsystem for water reclamation from urine. *SAE Paper 1999-01-1993, 29th International Conference on Environmental Systems, 1999.*
 6. Rifert V., Usenko V., Zolotukhin I., MacKnight A., Lubman A. (1999). Comparison of secondary water processors using distillation for space applications. *SAE Paper 99-70466, 29th International Conference on Environmental Systems (Denver, July 1999).*
 7. Rifert V, Stricun, A., Usenko, V. (2000). Study of dynamic and extreme performances of multistage centrifugal distiller with the thermoelectric heat pump. *SAE Technical Papers 2000. 30th International Conference on Environmental Systems (Toulouse; France, 10-13 July 2000).*
 8. Rifert, V., V. Usenko, I. Zolotukhin, A. MacKnight and A. Lubman (2001). Design optimisation of cascade rotary distiller with the heat pump for water reclamation from urine. (2001). *SAE Paper 2001-01-2248, 31st International Conference on Environmental Systems (Orlando, July 2001).*
 9. Rifert, V. G., Usenko V.I., Zolotukhin I.V., MacKnight A. and Lubman A. (2003). Cascaded distillation technology for water processing in space. *SAE Paper 2003-01-2625. 34th International Conference on Environmental Systems (Orlando, July 2003).*
 10. Lubman A, MacKnight A, Rifert V, Zolotukhin I. and Pickering K. (2006). Wastewater processing cascade distillation subsystem. design and evaluation. *SAE International, 2006-01-2273. July 2006.*
 11. Lubman A., MacKnight A., Rifert V. and Barabash, P. (2007). Cascade distillation subsystem hardware development for verification testing. *SAE International, 2007-01-3177, July 2007.*
 12. Callahan M., Lubman A., MacKnight A., Thomas H. and Pickering K. (2008). Cascade distillation subsystem development testing. (2008). *SAE International, 2008-01-2195, July 2008.*
 13. Callahan M., Lubman A. and Pickering K. (2009). Cascade distillation subsystem development: progress toward a distillation comparison test. (2009). *SAE International, 2009-01-2401, July 2009.*
 14. Callahan M., Patel V. and Pickering K. (2010). Cascade distillation subsystem development: early results from the exploration life support distillation technology comparison test. *American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2010-6149, July 2010.*
 15. McQuillan Jeff, Pickering Karn D., Anderson Molly, Carter Layne, Flynn Michael, Callahan Michael, Vega Leticia, Allada Rama and Yeh Jannivine. Distillation technology down-selection for the exploration life support (ELS) water recovery systems element. *40th International Conference on Environmental Systems, AIAA 2010-6125 (Barcelona, Spain. July 2010).*
 16. Patel V., Au H., Shull S., Sargusingh M., Callahan M.. (2014). Cascade distillation system – a water recovery system for deep space missions. *ICES-2014-12, 44 International Conference on Environmental Systems (Tucson, Arizona, July 2014).*
 17. Loeffelholz David, Baginski Ben, Patel Vipul, MacKnight Allen, Schull Sarah, Sargusingh

- Miriam, Callahan Michael. (2014). Unit operation performance testing of cascade distillation subsystem. *44th International Conference on Environmental Systems, 13-17 July 2014 (Tucson, Arizona). ICES-2014-0014.*
18. Callahan Michael R., Sargusingh Miriam J. (2014). Honeywell cascade distiller system performance testing interim results. American Institute of Aeronautics and Astronautics.
 19. Rifert V.G., Anatychuk L.I., Barabash P.A, Usenko V.I., Strikun A.P., Prybyla A.V. (2017). Improvement of the distillation methods by using centrifugal forces for water recovery in space flight applications. *J.Thermoelectricity*, 1, 71-83.
 20. Rifert Vladimir G., Barabash Petr A., Usenko Vladimir, Solomakha Andrii S., Anatychuk Lukyan I., Prybyla A.V. (2017). Improvement of the cascade distillation system for long-term space flights. 68th International Astronautical Congress (IAC) (Adelaide, Australia, 25-29 September 2017). IAC-17-A1.IP.25.
 21. Anatychuk L.I., Prybyla A.V. (2015). Optimization of thermal connections in thermoelectric liquid-liquid heat pumps for water purification systems of space application. *J.Thermoelectricity*, 4, 45 – 51.
 22. Anatychuk L.I., Prybyla A.V. (2015). Optimization of power supply system of thermoelectric liquid-liquid heat pump. *J.Thermoelectricity*, 6, 53 – 58.
 23. Anatychuk L.I., Rozver Yu.Yu., Prybyla A.V. (2017). Experimental study of thermoelectric liquid-liquid heat pump. *J.Thermoelectricity*, 3, С. 33 – 39.
 24. Anatychuk L.I., Prybyla A.V. (2017). Limiting possibilities of thermoelectric liquid-liquid heat pump. *J.Thermoelectricity*, 4, 33 – 39.
 25. Anatychuk L.I., Prybyla A.V. (2017). The influence of quality of heat exchangers on the properties of thermoelectric liquid-liquid heat pumps. *J.Thermoelectricity*, 5, 33 – 39.
 26. Anatychuk L.I., Prybyla A.V. (2017). On the coefficient of performance of thermoelectric liquid-liquid heat pumps with regard to energy loss for heat carrier transfer. *J.Thermoelectricity*, 6, 33 – 39.
 27. Rifert V.G., Anatychuk L.I., Barabash P.O., Usenko V.I., Strikun A.P, Solomakha A.S., Petrenko V.G., Prybyla A.V. (2019). Evolution of centrifugal distillation system with a thermoelectric heat pump for space missions. Part 1. Review of publications on centrifugal distillation in the period of 1990 – 2017. *J.Thermoelectricity*, 1.
 28. Perry Bruce A., Anderson Molly S. (2015). Improved dynamic modeling of the cascade distillation subsystem and analysis of factors affecting its performance. *45th International Conference on Environmental Systems 12-16 July 2015 (Bellevue, Washington). ICES-2015-216.*

Submitted 30.04.2019

УДК 537.32

Анатичук Л.І. *акад. НАН України*^{1,2}
Кобилянський Р.Р. *канд. фіз.-мат. наук*^{1,2},
Федорів Р.В.²

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

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

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
ПРОЦЕСУ КРІОДЕСТРУКЦІЇ ШКІРИ ЛЮДИНИ
ПРИ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОМУ ОХОЛОДЖЕННІ**

У роботі наведено результати комп'ютерного моделювання процесу кріодеструкції шкіри людини з врахуванням теплофізичних процесів, кровообігу, теплообміну, процесів метаболізму та фазового переходу. Побудовано фізичну, математичну та комп'ютерну моделі шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент при температурі -50°C. Визначено розподіли температури і теплових потоків у шкірі людини в режимі охолодження. Отримані результати дають можливість прогнозувати глибину промерзання шкіри і, відповідно, біологічної тканини при заданому температурному впливі. Бібл. 29, рис. 7.

Ключові слова: шкіра людини, температурний вплив, кріодеструкція, фазовий перехід, комп'ютерне моделювання.

Вступ

Загальновідомим у медичній практиці є той факт, що температурний вплив є важливим чинником лікування багатьох захворювань організму людини [1 – 3]. Одним з перспективних напрямів є кріодеструкція – сукупність хірургічних методів лікування, заснованих на локальному заморожуванні біологічної тканини людського організму. Таке охолодження в основному реалізується за допомогою спеціальних кріоінструментів із використанням рідкого азоту [4 – 8]. Проте використання рідкого азоту має низку недоліків: азот не дає можливість забезпечити охолодження з необхідною точністю підтримання температури, також існують ризики переохолодження з негативними наслідками. Крім того, рідкий азот є досить небезпечною речовиною і вимагає належної обережності під час використання, а доставка рідкого азоту не завжди доступна, що звужує можливості використання такого методу. Альтернативою азотному охолодженню може бути термоелектричне, яким реалізується зниження температури до 0 ÷ -80 °С. Термоелектричні прилади медичного призначення дають можливість точно задавати необхідну температуру робочого інструменту, час температурного впливу на відповідну ділянку людського організму та забезпечувати циклічну зміну режимів охолодження і нагріву [1 – 2, 9 – 12].

Створені до цього часу комп'ютерні моделі шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент, дають можливість проводити моделювання теплофізичних процесів з врахуванням кровообігу, теплообміну та процесів метаболізму [13 – 19]. Однак, існуючі комп'ютерні моделі не враховують фазовий перехід у біологічній тканині при її охолодженні, що призводить до похибки при комп'ютерному моделюванні температур і теплових потоків.

Тому метою даної роботи є врахування фазового переходу в біологічній тканині при комп'ютерному моделюванні процесу кріодеструкції шкіри людини.

Фізична модель

Згідно фізичної 2D моделі з осью симетрії (рис. 1) ділянка біологічної тканини тіла людини представляє собою структуру із трьох шарів шкіри (епідерміс 1, дерміс 2, підшкірний шар 3) і внутрішньої біологічної тканини 4 та характеризується наступними теплофізичними властивостями: теплопровідністю κ_i , питомою теплоємністю C_i , густиною ρ_i , швидкістю перфузії крові ω_{bi} , густиною крові ρ_b , температурою крові T_b , теплоємністю крові C_b і питомим тепловиділенням Q_{meti} внаслідок процесів метаболізму та прихованою теплотою фазового переходу L . Теплофізичні властивості шкіри та біологічної тканини тіла людини в нормальному та замороженому станах наведені в роботах [20 – 27]. Відповідні шари біологічної тканини 1-4 розглядаються як об'ємні джерела тепла q_i , де:

$$q_i = Q_{meti} + \rho_b \cdot C_b \cdot \omega_{bi} \cdot (T_b - T), \quad i = 1..4. \quad (1)$$

На поверхні шкіри знаходиться охолоджуючий елемент 5. Геометричні розміри кожного такого шару 1-4 складають a_i , b_i , і відповідно охолоджуючого елемента 5 – c , d . Температури на границях відповідних шарів 1-4 та охолоджуючого елемента 5 складають T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 , T_6 . Температура всередині біологічної тканини складає $T_1 = +37^\circ\text{C}$. Температура охолоджуючого елемента – $T_7 = -50^\circ\text{C}$. Температура оточуючого середовища – $T_8 = +22^\circ\text{C}$. Поверхня шкіри людини з температурою T_6 перебуває в стані теплообміну з оточуючим середовищем (коефіцієнт теплообміну α та коефіцієнт випромінювання ε) при температурі T_8 . Бокова поверхня шкіри адіабатично ізольована.

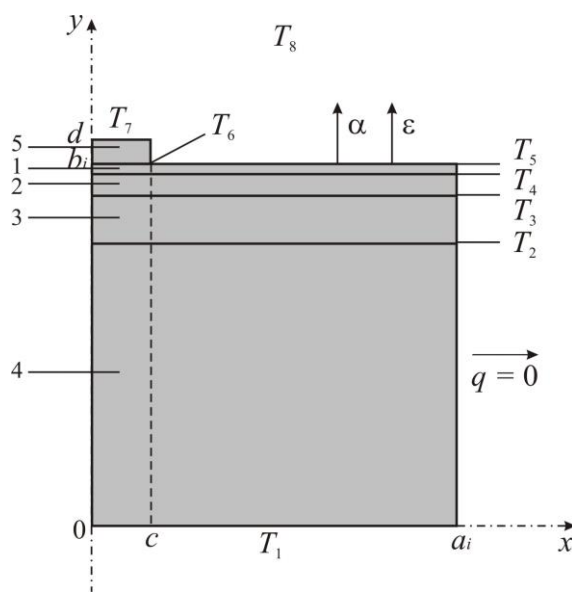


Рис. 1. Фізична 2D модель шкіри людини з осью симетрії: 1 – епідерміс, 2 – дерміс, 3 – підшкірний шар, 4 – внутрішня біологічна тканина, 5 – охолоджуючий елемент

Математична модель

У загальному вигляді рівняння теплообміну в біологічній тканині має наступний вигляд [20 – 27]:

$$C_i \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa_i \cdot \nabla T) + \rho_b \cdot C_b \cdot \omega_{bi} \cdot (T_b - T) + Q_{meti}, \quad i = 1..4, \quad (2)$$

де C_i , κ_i – питома теплоємність і теплопровідність відповідних шарів шкіри, ρ_b – густина крові, C_b – питома теплоємність крові, ω_{bi} – перфузія крові відповідних шарів, T_b – температура крові, T – температура біологічної тканини; Q_{meti} – тепло, що виділяється внаслідок процесів метаболізму в кожному шарі.

Ліва частина рівняння (2) представляє собою швидкість зміни теплової енергії, що міститься в одиниці об'єму біологічної тканини. Три доданки у правій частині цього рівняння являють собою відповідно швидкість зміни теплової енергії за рахунок теплопровідності, перфузії крові та тепла метаболізму.

Рівняння теплообміну в біологічній тканині (2) розв'язується з відповідними граничними умовами. Температура на поверхні охолоджуючого елемента складає $T_7 = -50$ °С. Всередині біологічної тканини температура $T_1 = +37$ °С. Бокові поверхні біологічної тканини адіабатично ізольовані ($q = 0$), а верхня поверхня шкіри знаходиться у стані теплообміну (коефіцієнт теплообміну α та коефіцієнт випромінювання ε) з оточуючим середовищем при температурі T_8 .

$$q(x, y, t) \Big|_{\substack{c \leq x \leq a \\ y = b_j}} = \alpha \cdot (T_8 - T_5) + \varepsilon \cdot \sigma \cdot (T_8^4 - T_5^4), \quad (3)$$

де α – коефіцієнт конвективного теплообміну поверхні шкіри з оточуючим середовищем, ε – коефіцієнт випромінювання, σ – стала Больцмана, T_5 – температура поверхні шкіри людини, T_8 – температура оточуючого середовища ($T_8 = +22$ °С).

У початковий момент часу $t=0$ с вважається, що температура у всьому об'ємі шкіри становить $T = +37$ °С, тобто початкові умови для розв'язання рівняння (2) наступні:

$$T(x, y, 0) = T_b. \quad (4)$$

У результаті розв'язання початково-крайової задачі (2)-(4) визначаються розподіли температури $T(x, y, t)$ і теплових потоків у відповідних шарах шкіри у довільний момент часу. Як приклад, у даній роботі розглянуто випадок, у якому температура охолоджуючого елемента складає $T_7 = -50$ °С. Однак, слід зазначити, що запропонована методика дозволяє розглянути випадки, коли температура охолоджуючого елемента $T_f(t)$ змінюється в будь-якому діапазоні температур або згідно наперед заданої функції.

У процесі заморожування клітини будуть проходити зміну фази в точці замерзання, при цьому матимуть місце втрати теплоти фазового переходу (L) і температура в цих клітинах не змінюватиметься. Фазовий перехід в біологічних клітинах відбувається в діапазоні температур (-1 ÷ -8) °С. Властивості шкіри та біологічної тканини в нормальному та замороженому станах наведені в роботах [20 – 27]. В інтервалі температур (-1 ÷ -8) °С, коли клітини заморожуються, поглинається теплота фазового переходу, що може бути змодельоване додаванням відповідної величини до теплоємності [26, 27].

При заморожуванні шкіри людини відбувається звуження судин у капілярах до заморожування всієї крові в капілярах, і значення ω_{bi} прямує до нуля. Крім того, клітини не зможуть генерувати метаболічне тепло при заморожуванні і Q_{meti} буде рівним нулю при температурі нижчій нуля.

У замороженому стані властивості шкіри та біологічної тканини будуть мати наступні значення (5) - (8):

$$C_i = \begin{cases} C_1 & T \geq -1^\circ\text{C} \\ \frac{L}{-1 - (-8)} + \frac{C_1 + C_2}{2} & -8^\circ\text{C} \leq T \leq -1^\circ\text{C} \\ C_2 & T \leq -8^\circ\text{C} \end{cases} \quad (5)$$

$$\kappa_i = \begin{cases} \kappa_1 & T \geq -1^\circ\text{C} \\ \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{2} & -8^\circ\text{C} \leq T \leq -1^\circ\text{C} \\ \kappa_2 & T \leq -8^\circ\text{C} \end{cases} \quad (6)$$

$$Q_{met_i} = \begin{cases} 420 & T \geq -1^\circ\text{C} \\ 0 & -8^\circ\text{C} \leq T \leq -1^\circ\text{C} \\ 0 & T \leq -8^\circ\text{C} \end{cases} \quad (7)$$

$$\omega_{b_i} = \begin{cases} 0.0005 & T \geq -1^\circ\text{C} \\ 0 & -8^\circ\text{C} \leq T \leq -1^\circ\text{C} \\ 0 & T \leq -8^\circ\text{C} \end{cases} \quad (8)$$

Комп'ютерна модель

Було створено комп'ютерну модель шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент. Для побудови комп'ютерної моделі використано пакет прикладних програм Comsol Multiphysics [28], що дає можливість проводити моделювання теплофізичних процесів у біологічній тканині з врахуванням кровообігу, теплообміну, процесів метаболізму та фазового переходу.

Розрахунок розподілів температур і теплових потоків у шкірі людини і, відповідно, біологічній тканині здійснювався методом скінченних елементів, суть якого полягає в тому, що досліджуваний об'єкт розбивається на велику кількість скінченних елементів і в кожному з них шукається значення функції, яке задовольняє заданим диференціальним рівнянням другого порядку з відповідними граничними умовами. Точність розв'язання поставленої задачі залежить від рівня розбиття і забезпечується використанням великої кількості скінченних елементів [28].

Як приклад, на рис. 2-3 наведено розподіли температури та ізотермічних поверхонь в об'ємі шкіри людини, на поверхні якої розміщено охолоджуючий елемент при температурі $T = -50^\circ\text{C}$.

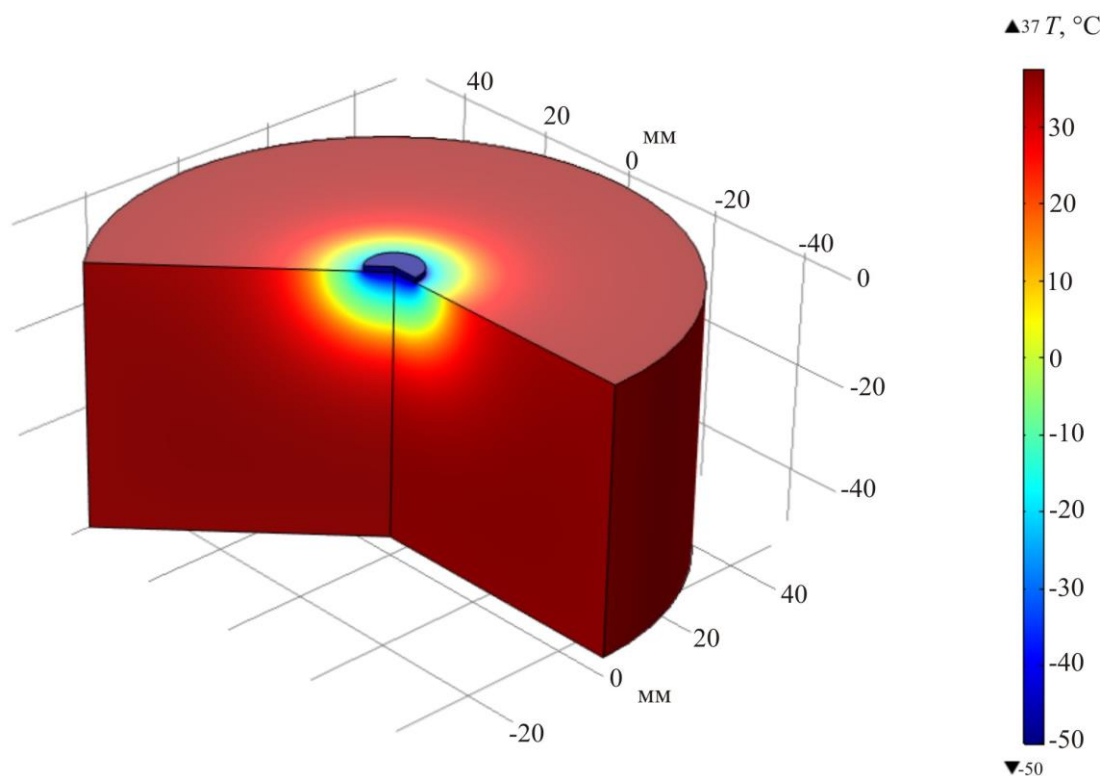


Рис. 2. Розподіл температури в об'ємі шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент при температурі $T = -50^{\circ}\text{C}$

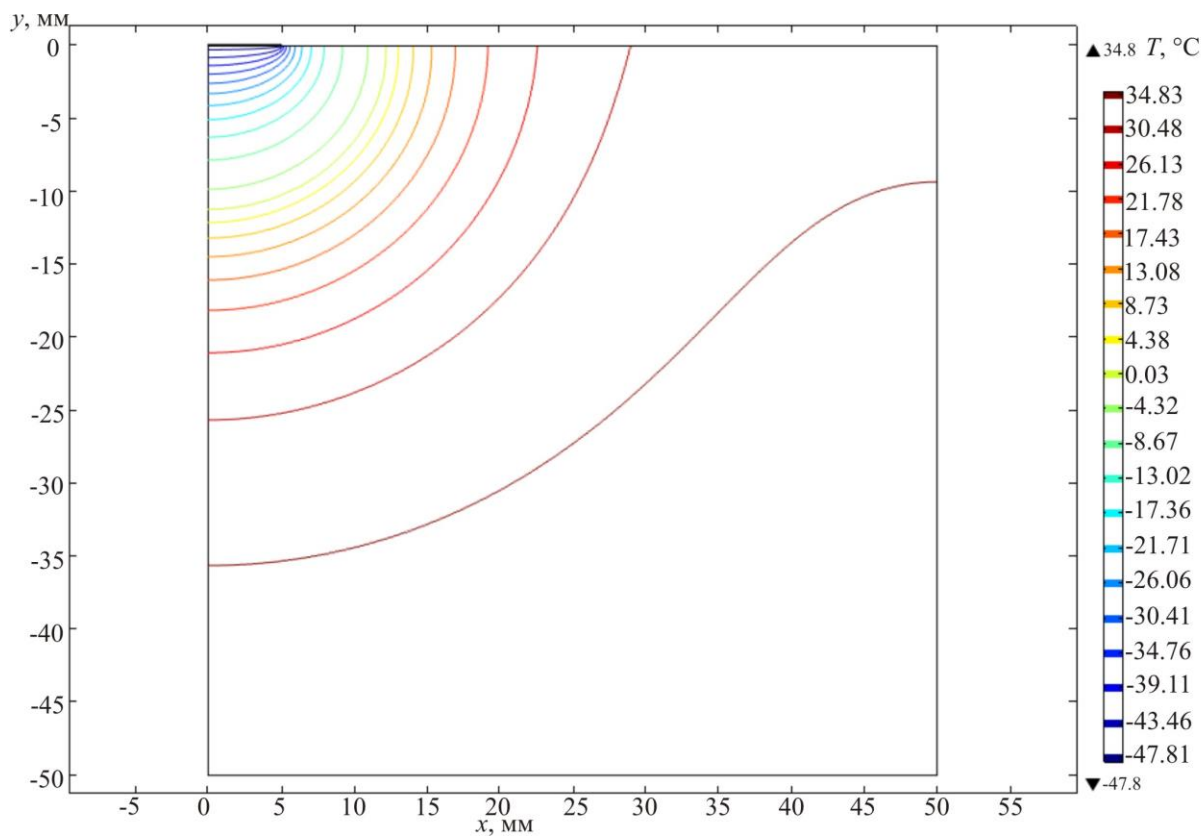
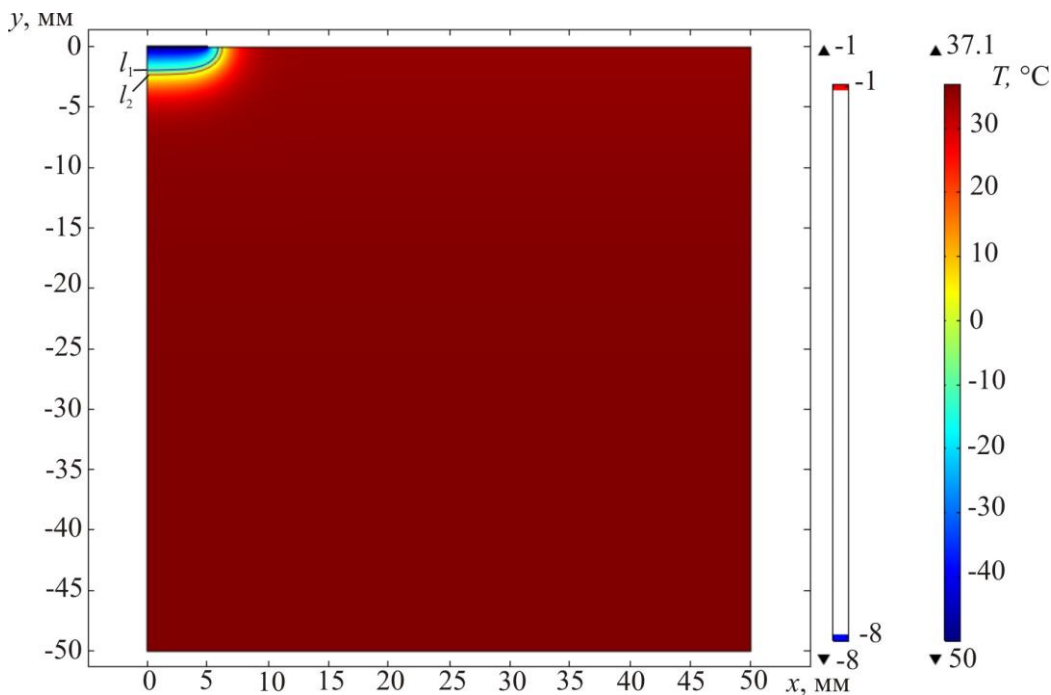


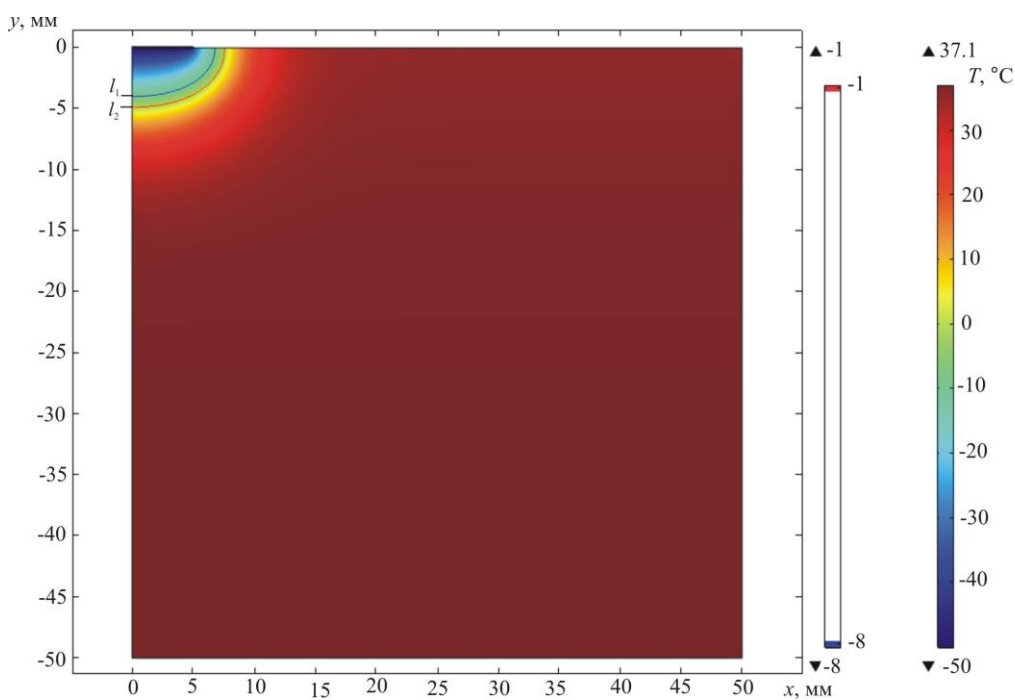
Рис. 3. Ізотермічні поверхні в об'ємі шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент при температурі $T = -50^{\circ}\text{C}$

Результати комп'ютерного моделювання

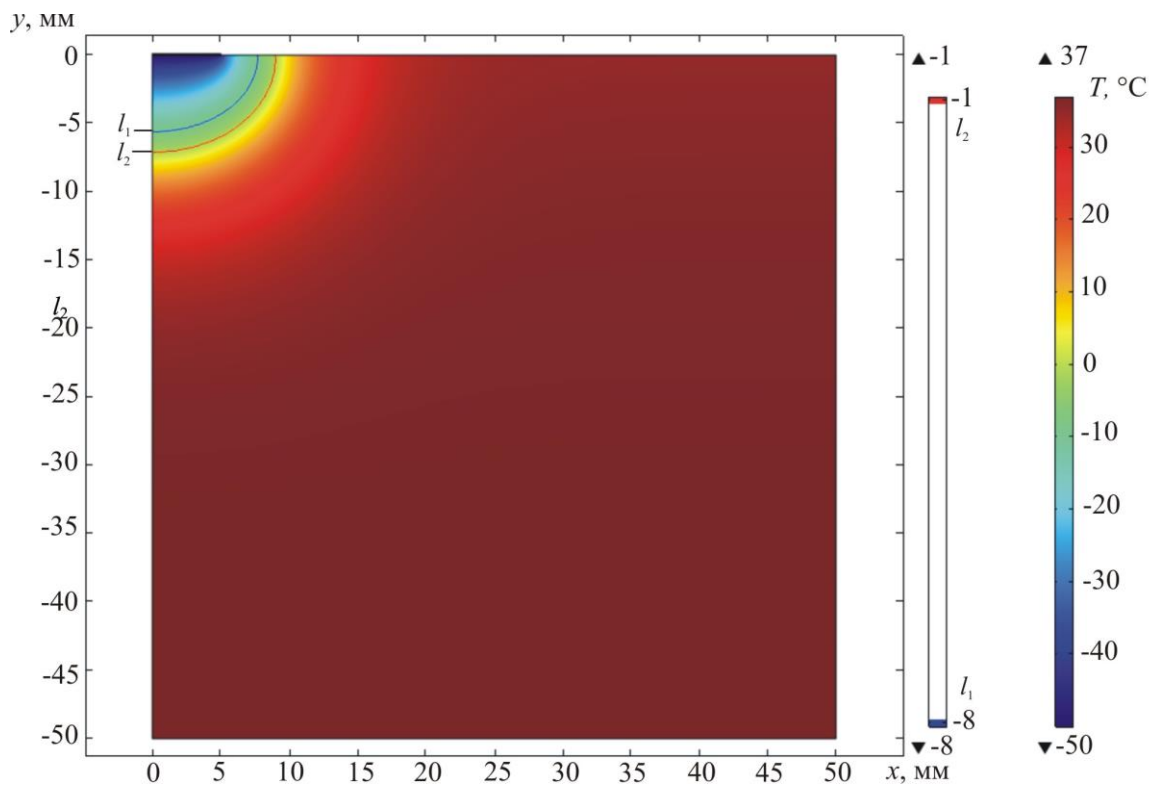
На рис. 4 а, б, в, г, д, е наведено розподіли температури в розрізі шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент при температурі $T = -50^\circ\text{C}$ в різні моменти часу $t = 10, 60, 180, 300, 600, 1200$ с. При цьому l_1 – це рівень температури $T = -8^\circ\text{C}$ та l_2 – рівень температури $T = -1^\circ\text{C}$.



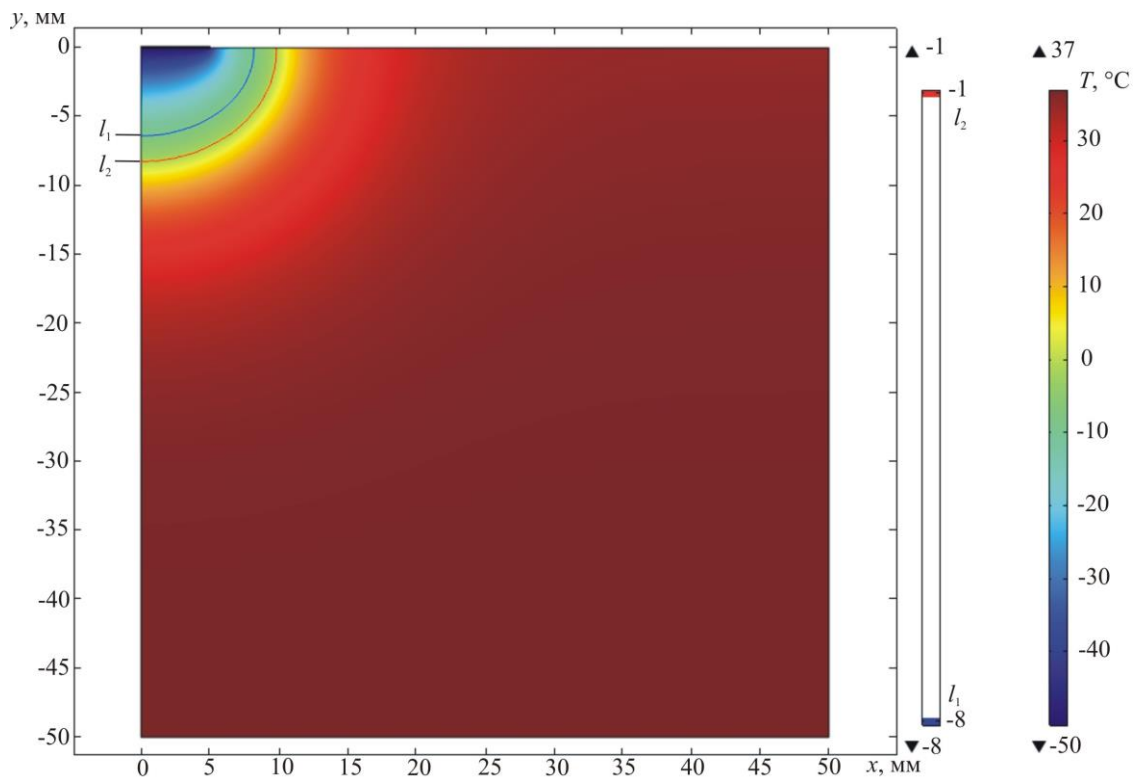
а) $t = 10$ с



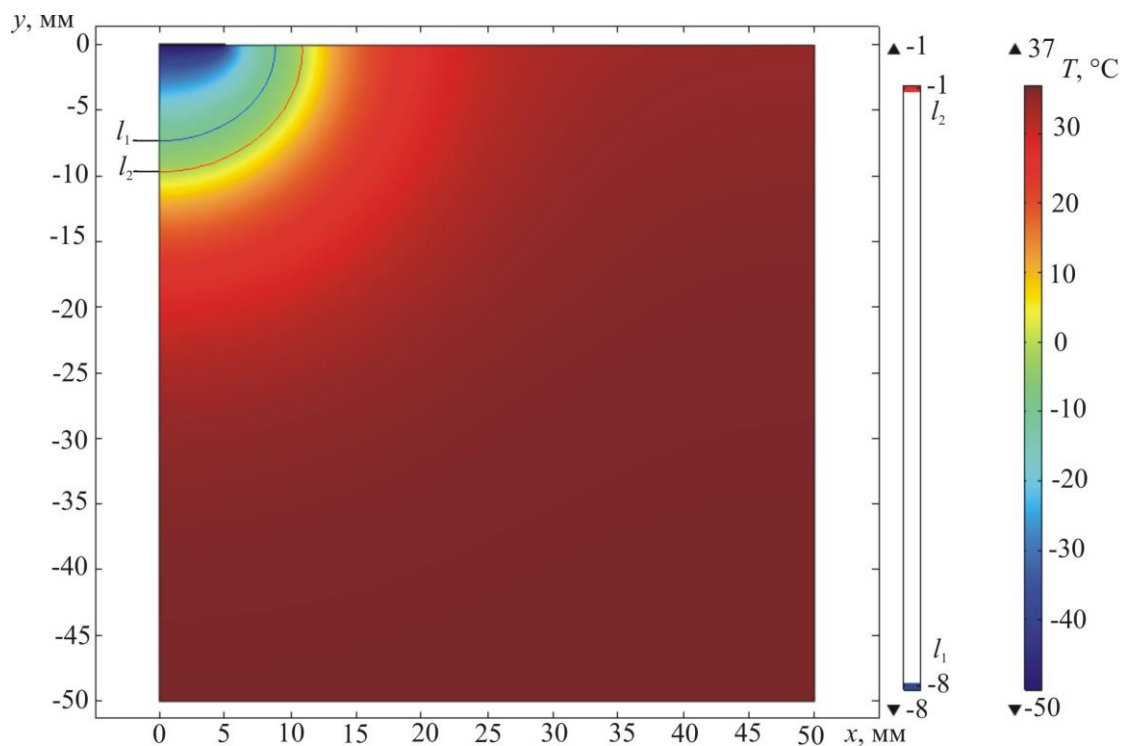
б) $t = 60$ с



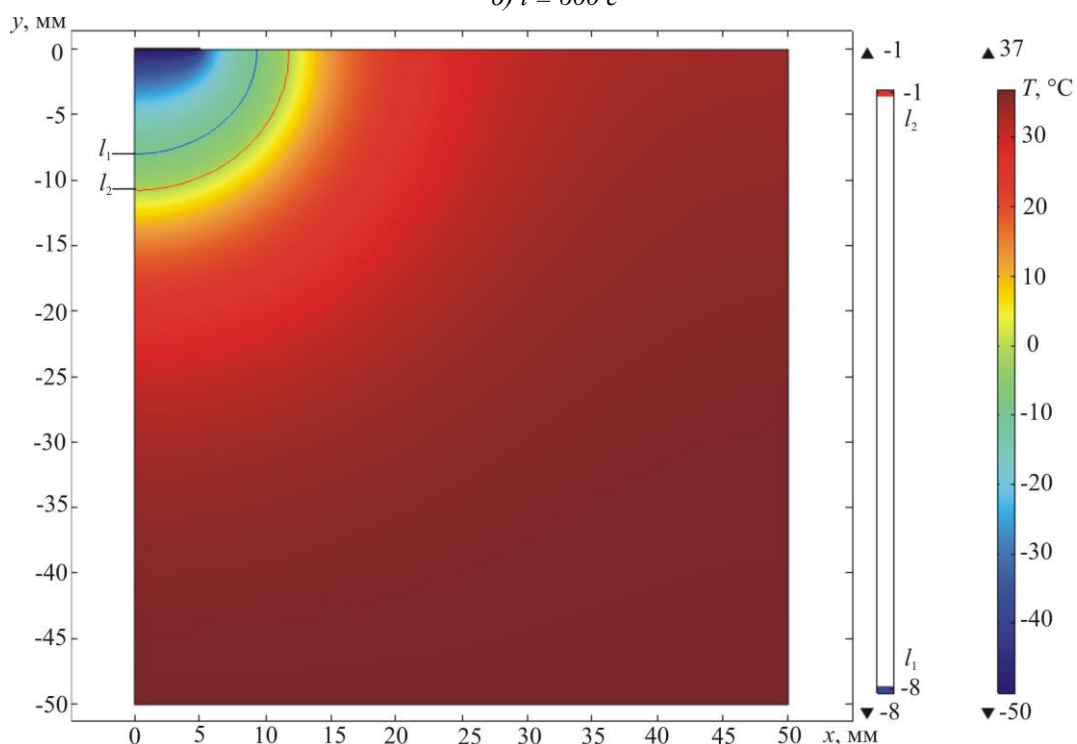
б) $t = 180 \text{ c}$



в) $t = 300 \text{ c}$



д) $t = 600 \text{ c}$



е) $t = 1200 \text{ c}$

Рис.4 а, б, в, г, д, е. Розподіли температури в розрізі шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент при температурі $T = -50^\circ\text{C}$, в різні моменти часу: а) $t = 10 \text{ c}$, б) $t = 60 \text{ c}$, в) $t = 180 \text{ c}$, г) $t = 300 \text{ c}$, д) $t = 600 \text{ c}$, е) $t = 1200 \text{ c}$, де l_1 – рівень температури $T = -8^\circ\text{C}$ та l_2 – рівень температури $T = -1^\circ\text{C}$

На рис. 5 наведено залежність руху зони фазового переходу (зони кристалізації біологічної тканини) від часу температурного впливу. Із рис. 5 видно, що максимальна глибина промерзання шкіри людини і, відповідно, біологічної тканини становить близько $l \approx 10$ мм при температурі охолоджуючого елементу $T = -50^\circ\text{C}$.

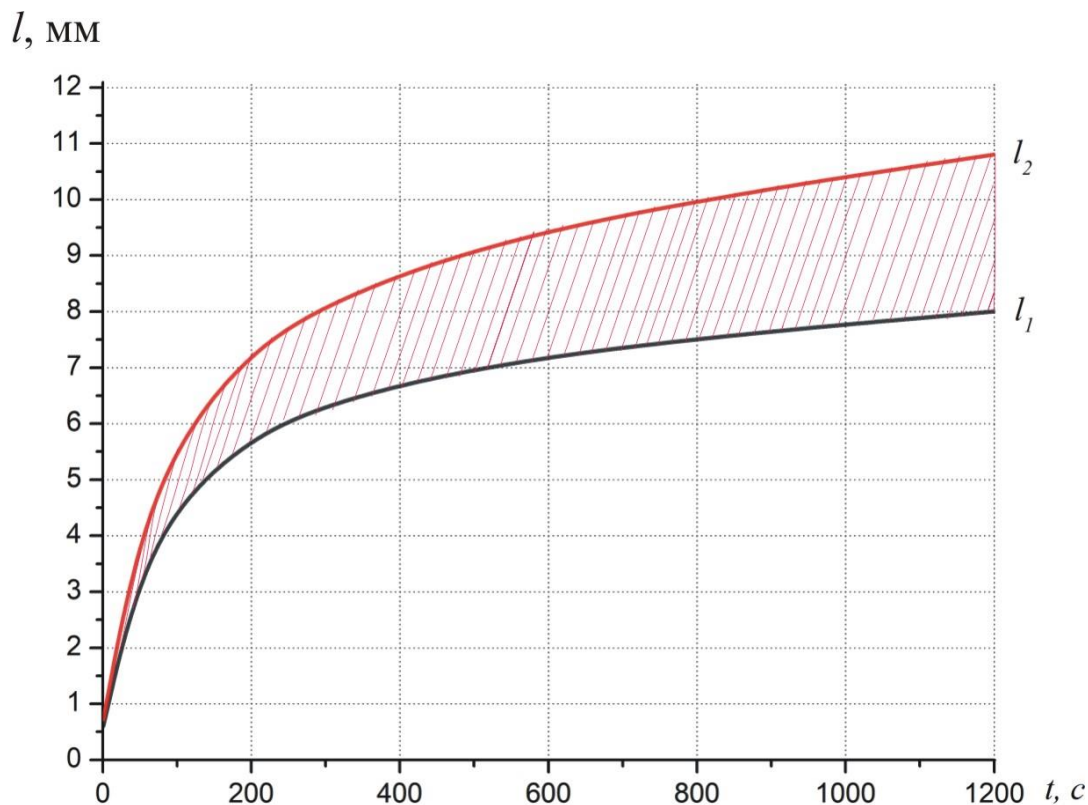


Рис. 5. Залежність руху зони фазового переходу (зони кристалізації біологічної тканини) від часу температурного впливу при температурі охолоджуючого елементу $T = -50^\circ\text{C}$:

l_1 – рівень температури $T = -8^\circ\text{C}$ та l_2 – рівень температури $T = -1^\circ\text{C}$

За допомогою комп'ютерного моделювання було визначено залежність глибини промерзання шкіри людини від температури в різний проміжок часу (рис. 6) та від часу температурного впливу при температурі охолоджуючого елементу $T = -50^\circ\text{C}$ (рис. 7).

З рис. 6, 7 видно, що при $t = 60$ с біологічна тканина охолоджується до температури $T = -10^\circ\text{C}$ на глибині $l \approx 3.5$ мм, при $t = 180$ с – на глибині $l \approx 5$ мм, а при $t = 600$ с – на глибині $l \approx 7$ мм та при $t = 1200$ с – на глибині $l \approx 7.5$ мм.

Встановлено, що при збільшенні експозиції температурного впливу досягається глибше охолодження шкіри людини. Тобто, при тривалому температурному впливі ($T = -50^\circ\text{C}$) можна досягти деструкції відповідної ділянки шкіри людини.

Таким чином, розроблено методику врахування фазового переходу в шкірі людини при комп'ютерному моделюванні процесу кріодеструкції, що дає можливість прогнозувати результати локального температурного впливу на біологічну тканину та визначати розподіли температури і теплових потоків у будь-який момент часу при наперед заданій довільній часовій функції зміни температури охолоджуючого елементу $T_f(t)$ [29].

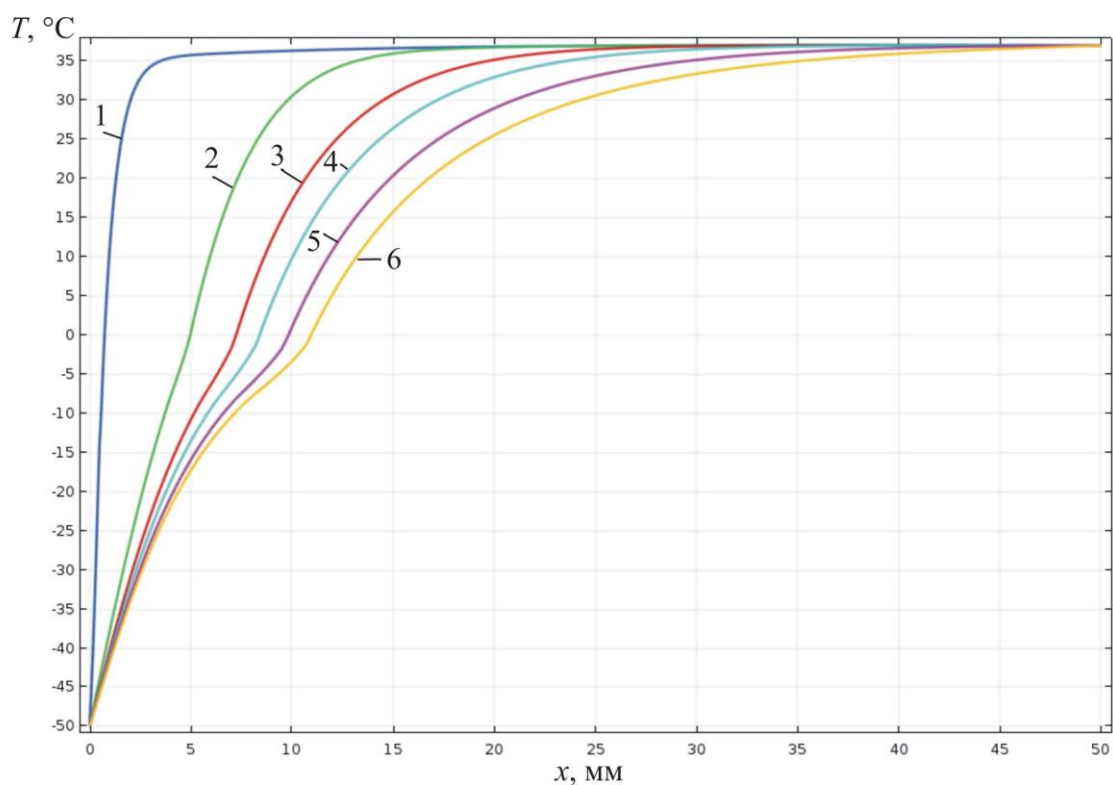


Рис. 6. Розподіл температури у шкірі людини в різні моменти часу температурного впливу:
 1 – $t = 1$ с; 2 – $t = 60$ с; 3 – $t = 180$ с; 4 – $t = 300$ с; 5 – $t = 600$ с; 6 – $t = 1200$ с

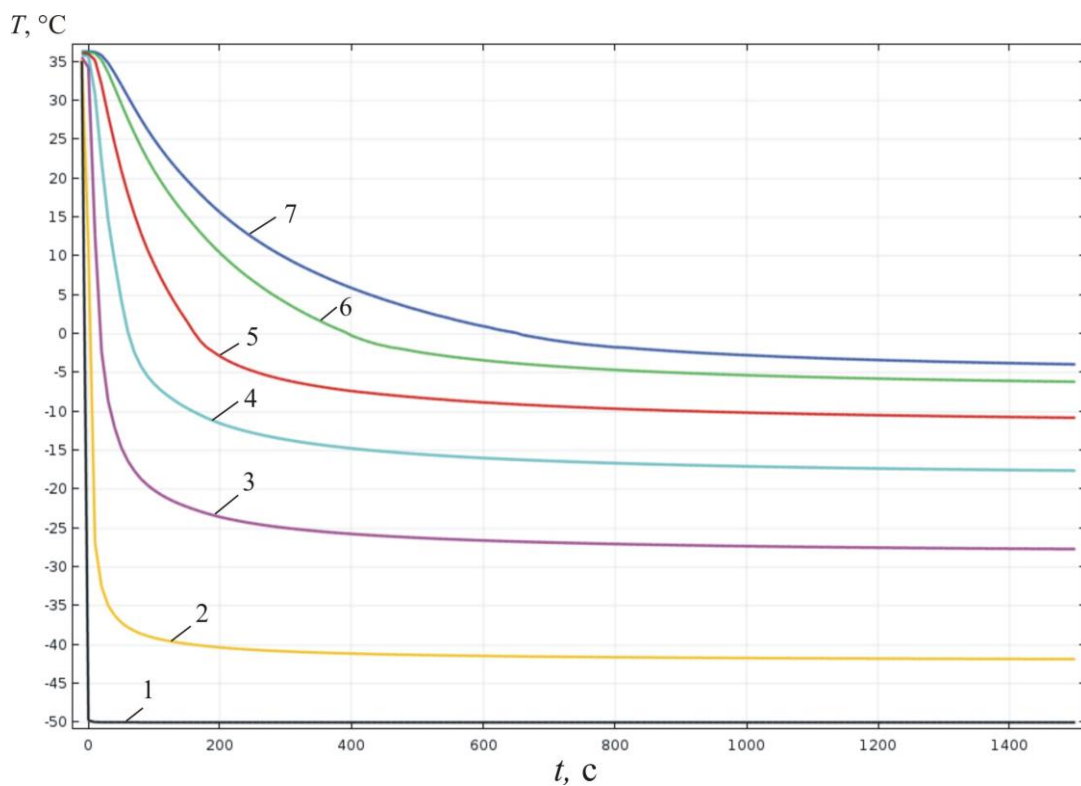


Рис. 7. Часова залежність температури на різній глибині h шкіри людини при температурі охолоджуючого елемента $T = -50^\circ\text{C}$: 1 – $h = 0$; 2 – $h = 1$ мм; 3 – $h = 3$ мм; 4 – $h = 5$ мм; 5 – $h = 7$ мм; 6 – $h = 9$ мм; 7 – $h = 10$ мм

Слід зазначити, що отримані результати дають можливість прогнозувати глибину промерзання шкіри і, відповідно, біологічної тканини при заданому температурному впливі з врахуванням фазового переходу для досягнення максимального ефекту при проведенні кріодеструкції шкіри людини. Вони є також необхідними для проектування термоелектричних холодильників для кріодеструкції шкіри і забезпечення необхідних режимів охолодження.

Висновки

1. Створено фізичну, математичну та комп'ютерну моделі шкіри людини, на поверхні якої знаходиться охолоджуючий елемент при температурі $T = -50^{\circ}\text{C}$, з врахуванням теплофізичних процесів, кровообігу, теплообміну, процесів метаболізму та фазового переходу.
2. За допомогою комп'ютерного моделювання визначено розподіли температури і теплових потоків у різних шарах шкіри з врахуванням фазового переходу під час процесу кріодеструкції шкіри людини. Встановлено залежність глибини промерзання шкіри людини від температури охолоджуючого елемента та часу температурного впливу. Визначено максимальну глибину промерзання шкіри, що становить $l \approx 10$ мм при температурі охолоджуючого елемента $T = -50^{\circ}\text{C}$.

Література

1. Анатичук Л.І. Термоэлементы и термоэлектрические устройства: / Л.І. Анатичук // Справочник. -К.: Наук. думка. - 1979. - 768 с.
2. Коленко Е.А. Термоэлектрические охлаждающие приборы. / Е.А. Коленко // Изд. 2-е. - Л.: Наука, 1967. - 283 с.
3. Анатичук Л.І., Денисенко О.І., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я., Перепічка М.П. Сучасні методи кріотерапії в дерматологічній практиці // Клінічна та експериментальна патологія. – Том XVI. – №1 (59). – 2017. – С. 150-156.
4. Денков В. На грани жизни / В. Денков // Пер. с болг. И. М. Сабуровой. - М.: «Знание», 1988. - 192 с.
5. Maruyama S., Nakagawa K., Takeda H. The flexible cryoprobe using Peltier effect for heat transfer control, Journal of Biomechanical science and engineering, 2008.- P. 138-150.
6. Коченов В.И. Крiохирургическая профилактическая онкология. / В.И. Коченов // Н. Новгород. – 2000. – 56 с.
7. Крiологическая профилактическая онкология: краткое учебное и методическое пособие для врачей и студентов / В.И. Коченов; Изд. Организация Нижегородская областная онкологическая ассоциация инвалидов. – 2-е изд., перераб. – Н.Новгород : Б.и., 2003. – 92с.
8. Коченов В.И. Адгезивный эффект в крiохирургии./ В.И. Коченов // Реферат в МРЖ.-р. IV.- 1982.-№8.
9. Москалик І.А., Маник О.М. Про використання термоелектричного охолодження у практиці кріодеструкції // Термоелектрика. – № 6. – 2013. – с.84-92.
10. Анатичук Л.І., Денисенко О.І., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я. Про використання термоелектричного охолодження в дерматології та косметології // Термоелектрика. – № 3. – 2015. – С. 57-71.
11. Москалик І.А. Про використання термоелектричних приладів у кріохірургії // Фізика і хімія твердого тіла. – №4.- 2015. – с. 742-746.

12. Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я. Про перспективи використання термоелектрики для лікування захворювань шкіри холодом // Науковий вісник Чернівецького університету: збірник наук. праць. Фізика. Електроніка. – Т. 5, Вип. 1. – Чернівці: Чернівецький національний університет, 2016. – С. 67-72.
13. Анатичук Л.І., Вихор Л.М., Коцур М.П., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я. Оптимальне керування часою залежністю температури охолодження в термоелектричних пристроях // Термоелектрика. – № 5. – 2016. – С.5-11.
14. Анатичук Л.І., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я. Комп'ютерне моделювання локального теплового впливу на шкіру людини // Термоелектрика. – № 1. – 2017. – С.69-79.
15. Анатичук Л.І., Вихор Л.М., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я. Комп'ютерне моделювання та оптимізація динамічних режимів роботи термоелектричного приладу для лікування захворювань шкіри // Термоелектрика. – № 2. – 2017. – С.44-57.
16. Анатичук Л.І., Вихор Л.М., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я., Зварич О.В. Комп'ютерне моделювання та оптимізація динамічних режимів роботи термоелектричного приладу для рефлексотерапії // Термоелектрика. – № 3. – 2017. – С.68-78.
17. Анатичук Л.І., Вихор Л.М., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я. Комп'ютерне моделювання та оптимізація динамічних режимів роботи термоелектричного приладу для кріодеструкції // Фізика і хімія твердого тіла. – Т.18. – № 4. – 2017. – С. 455-459.
18. L. Anatyshuk, L. Vikhor, M. Kotsur, R. Kobylanskyi, T. Kadenuk. Optimal Control of Time Dependence of Temperature in Thermoelectric Devices for Medical Purposes // International Journal of Thermophysics". – International Journal of Thermophysics (2018) 39:108. <https://doi.org/10.1007/s10765-018-2430-z>.
19. Анатичук Л.І., Вихор Л.М., Кобилянський Р.Р., Каденюк Т.Я. Комп'ютерне моделювання локального температурного впливу на шкіру людини у динамічному режимі // Вісник Національного університету „Львівська політехніка”. Серія: Фізико-математичні науки. – Львів : Видавництво Львівської політехніки. – № 898. – 2018. – С. 78-82.
20. Pennes H.H. Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting forearm *J. Appl. Physiol.* 1948. Vol. 1. no. 2. P. 93 – 122.
21. S.C. Jiang, N. Ma, H.J. Li and X.X. Zhang, Effects of Thermal Properties and Geometrical Dimensions on Skin Burn Injuries, *Burns* 28, 713 – 717 (2002).
22. M.P. Cetingul, C. Herman, Identification of Skin Lesions from the Transient Thermal Response Using Infrared Imaging Technique, *IEEE*, 1219 – 1222 (2008).
23. M. Ciesielski, B. Mochnacki and R. Szopa, Numerical Modeling of Biological Tissue Heating. Admissible Thermal Dose, *Scientific Research of the Institute of Mathematics and Computer Science* 1 (10), 11 – 20 (2011).
24. Florin Filipoiu, Andrei Ioan Bogdan and Iulia Maria Carstea, Computer-Aided Analysis of the Heat Transfer in Skin Tissue, *Proceedings of the 3rd WSEAS Int. Conference on Finite Differences - Finite Elements - Finite Volumes - Boundary Elements*, 2010, p. 53 – 59.
25. Daniela Carstea, Ion Carstea and Iulia Maria Carstea, Interdisciplinarity in Computer-Aided Analysis of Thermal Therapies, *WSEAS Transactions on Systems and Control* 6 (4), 115 – 124 (2011).
26. Z.S. Deng, J. Liu. Numerical simulation of selective freezing of target biological tissues following injection of solutions with specific thermal properties // *Cryobiology* 50 (2005) 183-192.

27. Han Liang Lim, Venmathi Gunasekaran. Mathematical Modeling of Heat Distribution during Cryosurgery // <https://isn.ucsd.edu/last/courses/beng221/problems/2011/project10.pdf>.
28. COMSOL Multiphysics User's Guide // COMSOLAB. 2018. 710 p.
29. Анатичук Л.І., Кобылянський Р.Р., Федорів Р.В. Методика урахування фазового переходу біологічної тканини при комп'ютерному моделюванні процесу криодеструкції // Термоелектричність. - №1. - 2019. с. С. 46 – 58.

Надійшла до редакції 08.04.2019

Анатичук Л.І. *акад. НАН України*^{1,2}
Кобылянський Р.Р. *канд. физ.-мат. наук*^{1,2},
Федорів Р.В.²

¹Інститут термоелектричності НАН і МОН України, ул. Науки, 1,
Чернівці, 58029, Україна, *e-mail: anatyck@gmail.com*;

²Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича, ул. Коцюбинського, 2,
Чернівці, 58012, Україна

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРИОДЕСТРУКЦИИ КОЖИ ЧЕЛОВЕКА ПРИ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ОХЛАЖДЕНИИ

В работе приведены результаты компьютерного моделирования процесса криодеструкции кожи человека с учетом теплофизических процессов, кровообращения, теплообмена, процессов метаболизма и фазового перехода. Построены физическая, математическая и компьютерная модели кожи человека, на поверхности которой находится охлаждающий элемент при температуре -50 °С. Определены распределения температуры и тепловых потоков в коже человека в режиме охлаждения. Полученные результаты дают возможность прогнозировать глубину промерзания кожи и, соответственно, биологической ткани при заданном температурном воздействии. Библ. 28, рис. 7.

Ключевые слова: кожа человека, температурное влияние, криодеструкция, фазовый переход, компьютерное моделирование.

Anatyck L.I. *acad. National Academy of Sciences of Ukraine*^{1,2},
Kobylanskyi R.R. *Candidate Phys.-math. Sciences*^{1,2},
Fedoriv R.V.²

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1, Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine;

²Yu.Fedkovich Chernivtsi National University,

2, Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

COMPUTER SIMULATION OF HUMAN SKIN CRYODESTRUCTION PROCESS DURING THERMOELECTRIC COOLING

The paper presents the results of computer simulation of human skin cryodestruction process with regard to thermophysical processes, blood circulation, heat transfer, metabolic processes and phase transition. The physical, mathematical and computer models were built for human skin, on the surface of which there is a cooling element at a temperature of -50°C . The distribution of temperature and heat fluxes in human skin was determined in cooling mode. The obtained results make it possible to predict the depth of freezing of the skin and, accordingly, biological tissue at a given temperature effect. Bibl. 28, Fig. 7.

Key words: human skin, temperature exposure, cryodestruction, phase transition, computer simulation.

References

1. Anatyshuk L.I. (1979). *Termoelementy i termoelektricheskiie ustroystva. Spravochnik [Thermoelements and thermoelectric devices. Reference book]*. Kyiv: Naukova Dumka [in Russian].
2. Kolenko E.A. (1967). *Termoelektricheskiie okhlazhdaiushchiie pribory [Thermoelectric cooling devices]. 2nd ed.* Leningrad: Nauka [in Russian].
3. Anatyshuk L.I., Denisenko O.I., Kobylianskyi R.R., Kadeniuk T.Ya., Perepichka M.P. (2017). Modern methods of cryotherapy in dermatological practice. *Klinichna ta eksperymental'na patologiiia - Clinical and experimental pathology*, XVI, (59), 150-156.
4. Denkov V. (1988). *At the edge of life.* Moscow: Znaniie [Russian transl.]
5. Maruyama S., Nakagawa K., Takeda H. (2008). The flexible cryoprobe using Peltier effect for heat transfer control. *Journal of Biomechanical Science and Engineering*, 138-150.
6. Kochenov V.I. (2000). *Kriokhirurgicheskaiia profilakticheskaiia onkologiia [Cryosurgical preventive oncology]*. Nizhnii Novgorod [in Russian].
7. Kochenov V.I. (2003). *Kriologicheskaiia profilakticheskaiia onkologiia: kratkoie uchebnoie I metodicheskoe posibiie dlia vrachei i studentov [Cryological preventive oncology: brief educational and methodological manual for doctors and students]*. 2nd revised ed. Nizhnii Novgorod [in Russian].
8. Kochenov V.I. (1982). Adhesive effect in cryosurgery. *Abstract in the International Abstract Journal*, IV, 8.
9. Moskalyk, I.A., Manyk O.M. (2013). On the use of thermoelectric cooling in cryodestruction practice. *J. Thermoelectricity*, 6, 84-92.
10. Anatyshuk L.I., Denisenko O.I., Kobylianskyi R.R., Kadeniuk T.Ya. (2015). On the use of thermoelectric cooling in dermatology and cosmetology. *J. Thermoelectricity*, 3, 57-71.
11. Moskalyk I.A. (2015). On the use of thermoelectric devices in cryosurgery. *Physics and Chemistry of the Solid State*, 4, 742-746.
12. Kobylianskyi R.R., Kadeniuk T.Ya. (2016) Pro perspektyvy vykorystannia termoelektryky dlia likuvannia zakhvoriuvan' shkiry kholodom [On the prospects of using thermoelectricity for treatment of skin diseases with cold]. *Naukovy visnyk Chernivetskogo universitetu: zbirnyk naukovykh ptrats. Fizyka. Elektronika - Scientific Bulletin of Chernivtsi University: Collection of Scientific Papers. Physics. Electronics*, 5, 1, 67 – 72 [in Ukrainian].
13. Anatyshuk L.I., Vikhor L.M., Kotsur M.P., Kobylianskyi R.R., Kadeniuk T.Ya. (2016). Optimal

- control of time dependence of cooling temperature in thermoelectric devices. *J.Thermoelectricity*, 5, 5-11.
14. Anatyshuk L.I., Kobylianskyi R.R., Kadaniuk T.Ya. (2017). Computer simulation of local thermal effect on human skin. *J.Thermoelectricity*, 1, 69-79.
 15. Anatyshuk L.I., Vikhor L.M., Kobylianskyi R.R., Kadaniuk T.Ya. (2017). Computer simulation and optimization of the dynamic operating modes of thermoelectric device for treatment of skin diseases. *J.Thermoelectricity*, 2, 44-57.
 16. Anatyshuk L.I., Vikhor L.M., Kobylianskyi R.R., Kadaniuk T.Ya., Zvarich O.V. (2017). Computer simulation and optimization of the dynamic operating modes of thermoelectric device for reflexotherapy. *J.Thermoelectricity*, 3, 68-78.
 17. Anatyshuk L.I., Vikhor L.M., Kobylianskyi R.R., Kadaniuk T.Ya. (2017). Computer simulation and optimization of the dynamic operating modes of thermoelectric device for cryodestruction. *Physics and Chemistry of the Solid State*, 18 (4), 455-459.
 18. Anatyshuk L., Vikhor L., Kotsur M., Kobylianskyi R., Kadaniuk T. (2018). Optimal control of time dependence of temperature in thermoelectric devices for medical purposes. *International Journal of Thermophysics* 39:108. <https://doi.org/10.1007/s10765-018-2430-z>.
 19. Anatyshuk L.I., Vikhor L.M., Kobylianskyi R.R., Kadaniuk T.Ya. (2018). Комп'ютерне моделювання локального температурного впливу на шкіру людини в динамічному режимі [Computer simulation of local temperature effect on human skin in the dynamic mode]. *Visnyk Natsionalnoho universitetu "Lvivska Politechnica". Physical and mathematical sciences – Bulletin of National university "Lvivska Politechnica." Physical and mathematical sciences*. Lviv: Lvivska Politechnical Publ., 898, 78-82.
 20. Pennes H.H. (1948). Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting forearm. *J. Appl. Physiol.* 1(2), 93 – 122.
 21. Jiang S.C., Ma N., Li H.J. and Zhang X.X. (2002). Effects of thermal properties and geometrical dimensions on skin burn injuries. *Burns* 28, 713 – 717.
 22. Cetingul M.P., Herman C. (2008). Identification of skin lesions from the transient thermal response using infrared imaging technique. *IEEE*, 1219 – 1222.
 23. Ciesielski M., Mochnacki B. and Szopa R. (2011). Numerical modeling of biological tissue heating. Admissible thermal dose. *Scientific Research of the Institute of Mathematics and Computer Science* 1 (10), 11 – 20.
 24. Filipoiu Florin, Bogdan Andrei Ioan and Carstea Iulia Maria (2010). Computer-aided analysis of the heat transfer in skin tissue. *Proceedings of the 3rd WSEAS Int. Conference on Finite Differences - Finite Elements - Finite Volumes - Boundary Elements*, 53 – 59.
 25. Carstea Daniela, Carstea Ion and Carstea Iulia Maria Carstea (2011). Interdisciplinarity in computer-aided analysis of thermal therapies. *WSEAS Transactions on Systems and Control*, 6 (4), 115 – 124.
 26. Deng Z.S., Liu J. (2005). Numerical simulation of selective freezing of target biological tissues following injection of solutions with specific thermal properties. *Cryobiology*, 50, 183-192.
 27. Han Liang Lim, Venmathi Gunasekaran. Mathematical modeling of heat distribution during cryosurgery // <https://isn.ucsd.edu/last/courses/beng221/problems/2011/project10.pdf>.
 28. COMSOL Multiphysics User's Guide (2018). COMSOLAB.
 29. L.I. Anatyshuk, R.R. Kobylianskyi, R.V. Fedoriv (2019). Method for taking into account the phase transition in biological tissue during computer-aided simulation of cryodestruction process. *J.Thermoelectricity*, 1, 42 – 54.

Submitted 08.04.2019



Горський П.В.

Горський П.В. док. фіз.-мат. наук^{1,2}
Мицканюк Н.В.^{1,2}

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

²Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, 58000, Україна



Мицканюк Н.В.

ПРО ТЕМПЕРАТУРНІ ЗАЛЕЖНОСТІ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЕРЕХІДНОГО ШАРУ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИЙ МАТЕРІАЛ-МЕТАЛ БЕЗ УРАХУВАННЯ ЯВИЩА ПЕРКОЛЯЦІЇ

У Розрахунковим шляхом отримано основні співвідношення, які визначають температурні залежності термоелектричних характеристик перехідних контактних шарів термоелектричний матеріал-метал без урахування теорії протікання. Конкретні кількісні результати та графіки температурних залежностей електричного та теплового контактних опорів, термоЕРС, фактору потужності та безрозмірної термоелектричної ефективності наведено для контактної пари телурид вісмуту – нікель. Встановлено, що разі нерівномірного розподілу атомів металу в інтервалі температур 200 – 400 К, інтенсивності надходження атомів металу у перехідний шар, яка відповідає зміні розподілу атомів металу за товщиною перехідного шару від лінійного до квадратичного та інтервалі товщин перехідного шару від 20 до 150 мкм електричний контактний опір змінюється від $1.8 \cdot 10^{-7}$ до $4.8 \cdot 10^{-6}$ Ом·см², тепловий контактний опір – від 0.022 до 0.35 К·см²/Вт, термоЕРС – від 155 до 235 мкВ/К, фактор потужності – від $1.6 \cdot 10^{-4}$ до $2.9 \cdot 10^{-4}$ Вт/(м·К²), безрозмірна термоелектрична ефективність – від 0.55 до 1.7. Бібл. 34, рис. 21.

Ключові слова: контакт термоелектричний матеріал – метал, приконтактний перехідний шар, електричний контактний опір, тепловий контактний опір, термоЕРС, фактор потужності, безрозмірна термоелектрична ефективність, температурні залежності.

Вступ

Ефективність термоелектричних модулів, яка в основному визначається добротністю термоелектричних матеріалів віток термоелементів, суттєво залежить від електричного опору контакту на границях між напівпровідниковими матеріалами віток з металевими комутаційними шарами. Контактний опір є однією з основних причин того факту, що в термоелектричних охолоджувачах і генераторах властивості матеріалів не реалізуються в повній мірі [1–3]. Загальновідомо, що тепло Джоуля, яке виділяється на контактних опорах, зменшує енергетичну ефективність термоелектричних перетворювачів і призводить до залежності їх характеристик від висоти віток термоелементів [4]. Вплив контактного опору на характеристики термоелектричних пристроїв стає більш суттєвим в умовах мініатюризації віток термоелементів, коли товщина перехідних контактних шарів термоелектричний матеріал (ТЕМ)-метал вздовж напрямків електричного струму стає співмірною з висотою термоелектричних віток [5, 6] Мініатюризація

термоелектричних перетворювачів енергії є сучасним напрямком їх вдосконалення [7–12], спрямованим в першу чергу на скорочення витрат термоелектричних матеріалів і здешевлення за рахунок цього термоелектричних модулів. Тому актуальними є дослідження електричних властивостей перехідних шарів ТЕМ-метал, спрямовані на зменшення величини контактного опору і збереження тим самим високих значень характеристик термоелектричних перетворювачів в умовах мініатюризації.

Для проектування термоелектричних модулів і розрахунку їх характеристик використовують значення контактного опору, встановлені експериментально. Для вимірювання цих значень застосовуються, як правило, достатньо складні методи і установки [13–17]. Контактний опір залежить від технології отримання термоелектричних матеріалів, способів формування їх контактів з металевими шарами, від попередньої обробки поверхонь напівпровідникових кристалів [16, 18–20] та інших факторів. Тому експериментальні величини контактного опору для конкретних пар ТЕМ-метал можуть суттєво відрізнятися, що ускладнює аналіз і оптимізацію структури перехідних контактних шарів. Теоретичні методи моделювання контактів ТЕМ-метал практично відсутні.

Тому *мета цієї роботи* – розробити модель структури перехідних контактних шарів ТЕМ-метал та методи оцінки величини електричного контактного опору такої структури, розрахувати температурні залежності контактного опору для термоелементів з традиційних матеріалів на основі ВіТе з ціллю подальшого їх застосування для проектування термоелектричних перетворювачів енергії, зокрема і з мікромініатюрними гілками.

Фізична модель перехідного шару ТЕМ-метал

У термоелектричних модулях, виготовлених за традиційною технологією, з'єднання віток n - і p -типів провідності в термоелементах здійснюється комутаційними пластинами, виготовленими з високопровідного металу, зокрема міді. Контакт напівпровідникового матеріалу з металевією комутацією, як правило, забезпечується паянням або з'єднанням за допомогою спеціальної електропровідної пасти. Для обмеження дифузії елементів комутації та припою або пасти в об'єм напівпровідникової вітки на її поверхню наноситься тонкий антидифузійний шар з металу, зазвичай нікелю [21–26], який окрім низької дифузії елементів забезпечує високу адгезію і надійний електричний контакт. Після нанесення металу на поверхню термоелектричного матеріалу біля границі розділу виникає перехідний контактний шар ТЕМ-метал. Фізичні процеси в перехідному шарі і є основною причиною контактного опору, який виникає при проходженні електричного струму через термоелемент.

Для ефективної роботи термоелектричних модулів контакти повинні бути омичними [21, 27]. В омичних контактах носії струму переходять із напівпровідника в метал, долаючи потенціальний бар'єр на границі ТЕМ-метал, який утворюється внаслідок відмінності енергетичної зонної структури напівпровідника і металу [28, 29]. Основною характеристикою омичного контакту є його опір, зведений до одиниці площі [30]. Цей опір містить дві основні складові. Перша – це опір r_1 перехідного приконтактного шару, друга – опір r_b , пов'язаний з переходом носіїв заряду через потенціальний бар'єр на границі між напівпровідником і металом. Цю другу складову прийнято називати електричним опором границі [31]. Однак, метою даної статті є розрахунок температурних залежностей термоелектричних характеристик перехідного шару без врахування наявності потенціального бар'єру.

Загальні формули для термоелектричних характеристик перехідного шару

На електричний опір перехідного шару впливають його склад і структура, які залежать від технології виготовлення контакту ТЕМ-метал. Найбільш поширеними методами нанесення металу на

поверхню напівпровідника є технології сплавлення, напилення, гальванічного покриття, епітаксії. Структуру перехідного шару зумовлюють два основні фізичні процеси. Це взаємна дифузія атомів (молекул) контактуючих матеріалів та їх хімічна взаємодія [32]. Традиційно нанесення антидифузійних шарів нікелю на поверхню термоелектричного матеріалу здійснюється шляхом гальванічного покриття. Як зазначено в [22, 23, 32], за умов такої технології структура перехідного шару характеризується відсутністю будь-яких хімічних сполук атомів металу з атомами (молекулами) напівпровідника. У цьому випадку основним фактором, яким визначаються електричні властивості перехідного шару, вважається ефект легування металом напівпровідника внаслідок взаємної дифузії [32], яка відбувається в умовах робочих режимів термоелементів. При цьому, слід зазначити, що перехідний шар відрізняється від об'ємного термоелектричного матеріалу неоднорідним просторовим розподілом домішкових атомів металу, що призводить до залежності електропровідності $\sigma_l(x)$ перехідного шару від безрозмірної координати $x = \tilde{x}/h$ де h – товщина перехідного шару, $x \in [0,1]$. Припустимо, що електропровідність змінюється неперервно від її значення σ_m в металі до значення σ_s в термоелектричному матеріалі, тобто функція $\sigma_l(x)$ задовольняє вимогам

$$\sigma_m = \sigma_l(0), \quad \sigma_s = \sigma_l(1). \quad (1)$$

Для встановлення вигляду залежності $\sigma_l(x)$ скористаємося поняттям розподілу об'ємної частки домішки металу в матеріалі приконтактного перехідного шару, яка визначається відношенням об'ємів атомів домішки до всіх атомів (молекул) перехідного шару, що знаходяться в елементарному об'ємі товщиною dx на віддалі x від поверхні металу $x=0$ і обчислюється за співвідношенням

$$v(x) = \frac{(A_m/\gamma_m)n(x)}{(A_m/\gamma_m)n(x) + (A_s/\gamma_s)(n_0 - n(x))}, \quad (2)$$

де A_s, A_m – атомна або молекулярна маса, γ_s, γ_m – густина напівпровідникового термоелектричного матеріалу та металу відповідно, $n(x)$ – розподіл концентрації атомів металу в перехідному шарі, який встановлюється в стаціонарних робочих режимах термоелемента в результаті дифузії, n_0 – концентрація атомів металу, які можуть дифундувати. Формула (2) є коректною за умови логічного припущення, що частина елементарного об'єму перехідного шару, незайнята атомами металу, вважається зайнятою атомами (молекулами) термоелектричного матеріалу.

Функція $n(x)$ є розв'язком одновимірної крайової задачі стаціонарної дифузії за наявності постійного джерела атомів металу з крайовими умовами $n(0)=n_0, n(1)=0$, який за умови сталості коефіцієнту дифузії D та інтенсивності Q джерела з концентрацією n_0 , має вигляд:

$$n(x) = n_0 [1 - (1 - A)x - Ax^2]. \quad (3)$$

де n_0 – концентрація атомів у металі, безрозмірний параметр $A = Qd_0^2/2Dn_0$ характеризує режим і умови створення контакту.

За цих припущень безрозмірна функція (2) розподілу об'ємної частки домішки $v(y)$ набуває вигляду

$$v(y) = \frac{(A_m/\gamma_m)[1 - (1 - A)y - Ay^2]}{(A_m/\gamma_m)[1 - (1 - A)y - Ay^2] + (A_s/\gamma_s)[(1 - A)y + Ay^2]}, \quad (4)$$

причому для неї виконуються умови

$$v(0) = 1, \quad v(1) = 0. \quad (5)$$

Вважатимемо, що електропровідність пропорційна концентрації носіїв заряду у випадку легуючої домішки пропорційна концентрації атомів домішки. Внаслідок цього вигляд координатної залежності електропровідності перехідного шару $\sigma_l(y)$ буде визначатися координатною залежністю (4) об'ємної частки $v(y)$ домішки металу. Тоді $\sigma_l(y)$ без урахування явища перколяції, коли атоми металу не утворюють кластерів, визначатиметься через $v(y)$ функцією

$$\sigma_l(y) = \sigma_s + (\sigma_m - \sigma_s)v(y), \quad (6)$$

для якої, враховуючи (5), будуть виконуватися вимоги (1). Формула (6) співпадає з класичною формулою для узагальненої провідності композиту.

За такої апроксимації величину електричного опору приконтактного перехідного шару можна оцінити за формулою

$$r_{ce} = h \int_0^1 \frac{dy}{\sigma_l(y)}. \quad (7)$$

Співвідношення, аналогічне до співвідношення (6) справедливе і для теплопровідності перехідного шару:

$$\kappa_l(y) = \kappa_s + (\kappa_m - \kappa_s)v(y), \quad (8)$$

де κ_s та κ_m – теплопровідності ТЕМ та металу відповідно, тому для електричного контактного опору справедливе співвідношення:

$$r_{ct} = h \int_0^1 \frac{dy}{\kappa_l(y)}. \quad (9)$$

Для термоЕРС справедливе співвідношення:

$$\alpha = \frac{\int_0^1 \{(\alpha_m/\kappa_m)v(y) + (\alpha_s/\kappa_s)[1 - v(y)]\} dy}{\int_0^1 \{\kappa_m^{-1}v(y) + \kappa_s^{-1}[1 - v(y)]\} dy}. \quad (10)$$

Апроксимація температурних залежностей характеристик термоелектричного матеріалу та металу

Для розрахунку температурних залежностей контактного опору нам знадобляться температурні залежності термоелектричних характеристик ТЕМ та металу. Цю апроксимацію можна здійснити двома шляхами, а саме, шляхом побудови регресійних моделей на підставі експериментальних даних, або ж суто розрахунковим шляхом на основі певних модельних уявлень про мікроскопічні механізми перенесення заряду і тепла у матеріалі. У даній статті ми використаємо другий шлях.

Почнемо з термоелектричних характеристик ТЕМ. Нехай за деякої температури T_0 нам відомі його термоелектричні параметри, а саме термоЕРС $\alpha_{s,0}$, електропровідність $\sigma_{s,0}$ та теплопровідність $\kappa_{s,0}$. Для побудови їх температурних залежностей за цими даними зробимо наступні модельні припущення:

- 1) зонний спектр носіїв заряду у ТЕМ є параболічним та ізотропним з незалежною від температури ефективною масою;
- 2) квазіпружне розсіювання носіїв заряду в актуальній температурній області відбувається на деформаційному потенціалі акустичних фононів з незалежним від енергії перерізом і довжиною вільного пробігу, обернено пропорційною до температури;
- 3) ґраткова частина теплопровідності напівпровідника визначається розсіюванням фононів одного на одному з перекиданням і є обернено пропорційною до температури.

За умови справедливості цих припущень показник розсіювання носіїв заряду $r = -0.5$. З врахуванням його значення побудова необхідних температурних залежностей на основі відомих загальних співвідношень [33] здійснюється у наступному порядку.

Зі співвідношення для термоЕРС

$$\alpha_{s0} = \frac{k}{e} \left[\frac{2F_1(\eta_0)}{F_0(\eta_0)} - \eta_0 \right] \quad (11)$$

знаходимо зведений хімічний потенціал η_0 газу носіїв заряду за температури T_0 .

Використовуючи умову сталості концентрації носіїв заряду, з рівняння

$$\frac{T^{1.5} F_{0.5}(\eta)}{T_0^{1.5} F_{0.5}(\eta_0)} = 1 \quad (12)$$

визначаємо температурну залежність зведеного хімічного потенціалу η газу носіїв заряду від температури T у заданому інтервалі температур.

Зі співвідношення

$$\alpha_s = \frac{k}{e} \left[\frac{2F_1(\eta)}{F_0(\eta)} - \eta \right] \quad (13)$$

визначаємо температурну залежність термоЕРС ТЕМ.

Зі співвідношення

$$L_s(\eta) = \left(\frac{k}{e} \right)^2 \left[\frac{3F_2(\eta)}{F_0(\eta)} - \frac{4F_1^2(\eta)}{F_0^2(\eta)} \right] \quad (14)$$

визначаємо температурну залежність числа Лоренца ТЕМ.

Температурна залежність електропровідності ТЕМ за зазначених вище модельних припущень визначається так:

$$\sigma_s = \sigma_{s0} \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1.5} \frac{F_0(\eta) F_{0.5}(\eta_0)}{F_{0.5}(\eta) F_0(\eta_0)}. \quad (15)$$

Температурна залежність теплопровідності з врахуванням усього, сказаного вище, визначається так:

$$\kappa_s = \sigma_s L_s(\eta) T + [\kappa_{s0} - \sigma_{s0} L_s(\eta_0) T_0] \frac{T_0}{T}. \quad (16)$$

У формулах (11) – (16) через $F_m(\eta)$ позначено інтеграли Фермі, які визначаються наступним співвідношенням:

$$F_m(\eta) = \int_0^{\infty} x^m [\exp(x - \eta) + 1]^{-1} dx. \quad (17)$$

Співвідношення (11) – (17) повністю визначають температурні залежності термоЕРС, електропровідності та теплопровідності ТЕМ.

Перейдемо до апроксимації температурних залежностей електропровідності, теплопровідності та термоЕРС металу. Будемо вважати, що в металі, так само, як і в ТЕМ, розсіювання вільних носіїв заряду відбувається на деформаційному потенціалі акустичних фононів, причому, в актуальній області температур довжина вільного пробігу носіїв заряду є обернено пропорційною до температури. Тоді, враховуючи сильне виродження носіїв заряду у металі, температурну залежність його електропровідності визначатимемо так [34]:

$$\sigma_m = \sigma_{m0} \cdot (T_0/T), \quad (18)$$

і, отже, враховуючи співвідношення Відемана-Франца, теплопровідність металу κ_m будемо вважати незалежною від температури. Незалежною від температури будемо вважати і термоЕРС металу α_m .

Результати розрахунку температурних залежностей термоелектричних характеристик перехідного контактного шару ТЕМ-метал та їх обговорення.

Температурні залежності електричного та теплового контактних опорів, термоЕРС та безрозмірної термоелектричної ефективності перехідного контактного шару «ТЕМ-метал» для пари телурид вісмуту-нікель, отримані в рамках описаної вище методики розрахунку за умови, що нерівномірний розподіл атомів металу у товщі перехідного шару зберігається, наведено на рис. 1 – 7.

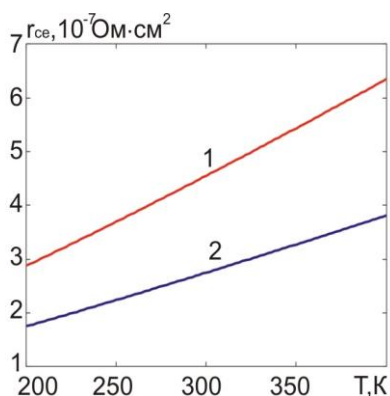


Рис.1. Температурні залежності електричного контактного опору за товщини перехідного шару, рівної 20 мкм: 1 – $A=0$; 2 – $A=1$.

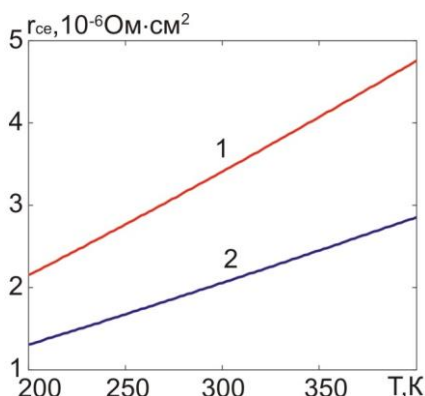


Рис.2. Температурні залежності електричного контактного опору за товщини перехідного шару, рівної 150 мкм: 1 – $A=0$; 2 – $A=1$.

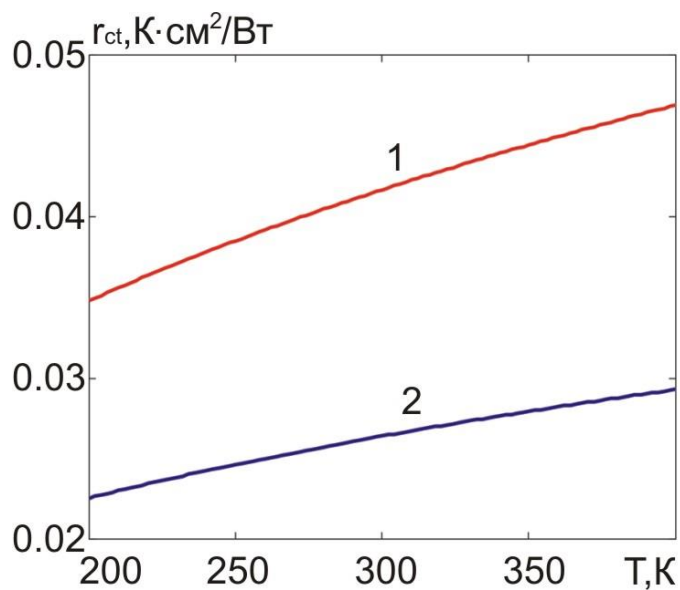


Рис.3. Температурні залежності теплового контактного опору за товщини перехідного шару, рівної 20 мкм:
1 – A=0; 2 – A=1.

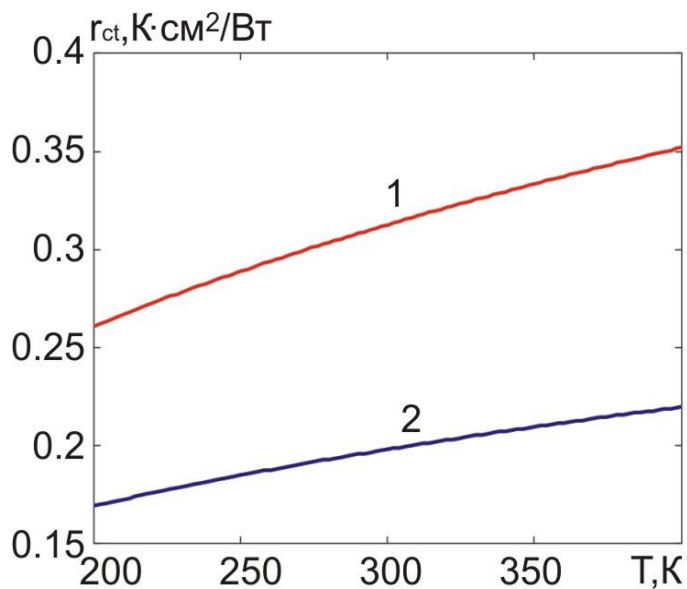


Рис.4. Температурні залежності теплового контактного опору за товщини перехідного шару, рівної 150 мкм:
1 – A=0; 2 – A=1.

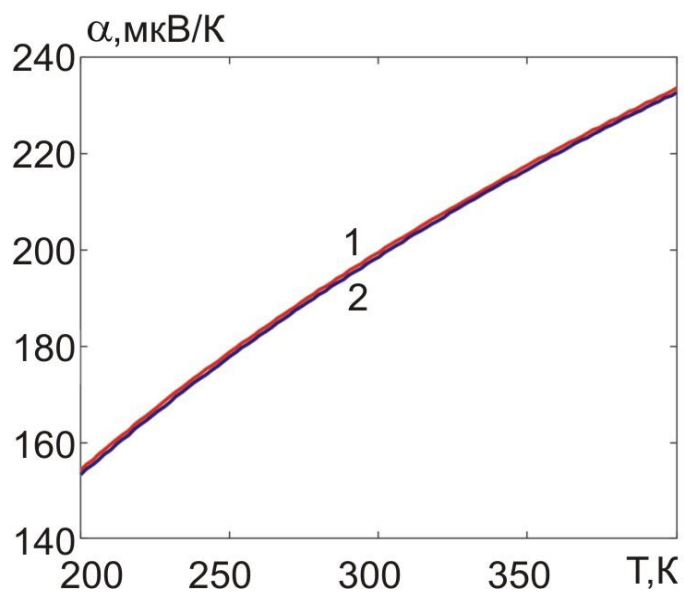


Рис.5. Температурні залежності термоЕРС перехідного шару:
1 – $A=0$; 2 – $A=1$.

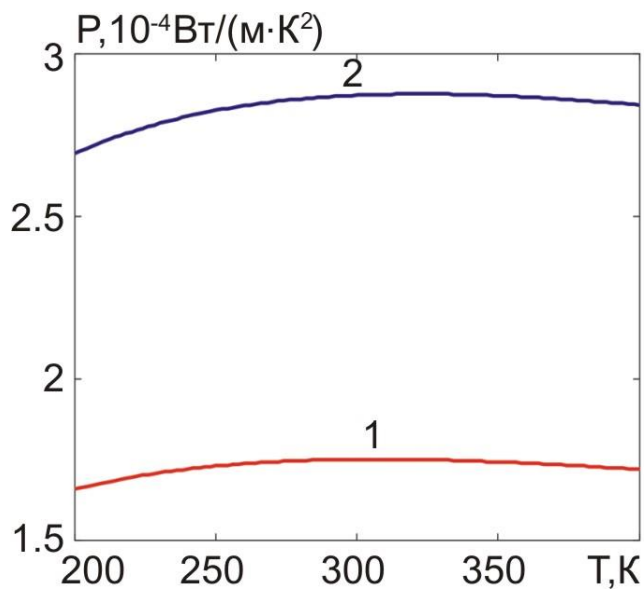


Рис. 6. Температурні залежності фактору потужності
перехідного шару: 1 – $A=0$; 2 – $A=1$.

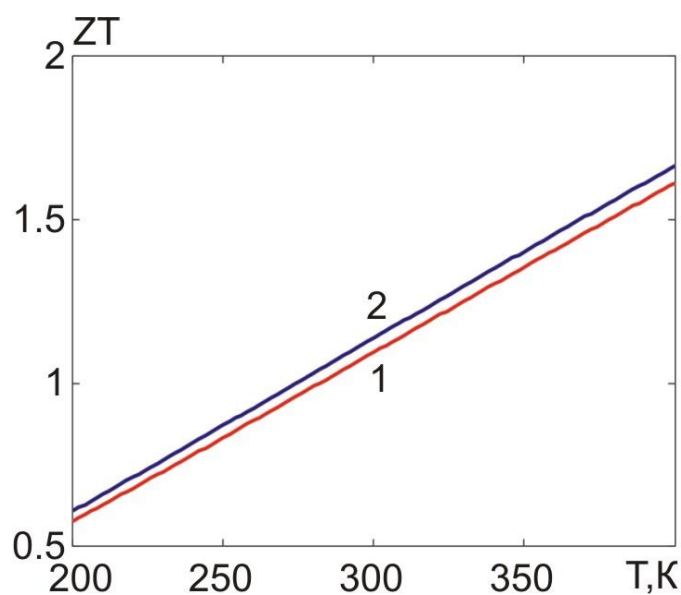


Рис. 7. Температурні залежності безрозмірної термоелектричної ефективності перехідного шару: 1 – $A=0$; 2 – $A=1$.

При побудові графіків взято такі параметри матеріалів за 300К: $\sigma_m=1.25 \cdot 10^5$ См/см, $\sigma_s = 800$ См/см, $\kappa_m = 92$ Вт/(м·К), $\kappa_s = 1.4$ Вт/(м·К), $\alpha_m = -23$ мкВ/К, $\alpha_s = 200$ мкВ/К, і, окрім того, $A_m = 58.5$, $A_s = 801$, $\rho_m = 9100$ кг/м³, $\rho_s = 7700$ кг/м³. З рисунків видно, що у дослідженому інтервалі температур електричний та тепловий контактні опори, термоЕРС та безрозмірна термоелектрична ефективність перехідного шару зростають, а фактор потужності має максимум в інтервалі 300 – 350 К. Такі температурні залежності можна пояснити зростанням питомих опорів металу і напівпровідника, зменшенням їх теплопровідності та зростанням термоЕРС напівпровідника при зростанні температури. Зі зростанням товщини перехідного шару електричний та тепловий контактні опори зростають пропорційно до цієї товщини. Наявність максимуму на температурній залежності фактору потужності пояснюється двома конкуруючими процесами: зростанням термоЕРС і зменшенням електропровідності ТЕМ зі зростанням температури. При цьому слід зазначити, що термоЕРС перехідного шару в основному визначається напівпровідником внаслідок того, що теплопровідність металу істотно більша за теплопровідність напівпровідника.

Окрім того з рисунків видно, що зі зростанням параметру A , тобто інтенсивності надходження атомів металу у перехідний шар тепловий та електричний контактні опори, а також термоЕРС спадають, а фактор потужності та безрозмірна термоелектрична добротність зростає. В цілому у досліджених інтервалах температур, інтенсивності надходження металу у перехідний шар та товщин перехідного шару електричний контактний опір змінюється від $1.8 \cdot 10^{-7}$ до $4.8 \cdot 10^{-6}$ Ом·см², тепловий контактний опір – від 0.022 до 0.35 К·см²/Вт, термоЕРС – від 155 до 235 мкВ/К, фактор потужності – від $1.6 \cdot 10^{-4}$ до $2.9 \cdot 10^{-4}$ Вт/(м·К²), безрозмірна термоелектрична ефективність – від 0.55 до 1.7.

Вплив вирівнювання концентрації металу у перехідному шарі на температурні залежності його термоелектричних характеристик.

Викладені вище результати отримано у припущенні, що розподіл об'ємної частки металу у перехідному шарі підлягає співвідношенню (4). Однак найбільш інтенсивне надходження атомів металу у перехідний шар має місце безпосередньо під час створення контакту. Далі, особливо за низьких температур, ця інтенсивність істотно знижується і неоднорідний розподіл металу у

перехідному шарі вирівнюється. Тому має певний зміст дослідження впливу цього вирівнювання на температурні залежності термоелектричних характеристик перехідного шару. Після вирівнювання середня усталена об'ємна частка металу в перехідному шарі визначатиметься так:

$$v_{ma} = \int_0^1 \frac{(A_m/\gamma_m)[1 - (1-A)y - Ay^2]}{(A_m/\gamma_m)[1 - (1-A)y - Ay^2] + (A_s/\gamma_s)[(1-A)y + Ay^2]} dy, \quad (19)$$

Тому усталена електропровідність перехідного шару без урахування теорії протікання визначатиметься так:

$$\sigma_a = \sigma_s + (\sigma_m - \sigma_s)v_{ma}, \quad (20)$$

а його електричний контактний опір так:

$$r_{ce} = h/\sigma_a. \quad (21)$$

Усталена теплопровідність перехідного шару визначатиметься так:

$$\kappa_a = \kappa_s + (\kappa_m - \kappa_s)v_{ma}, \quad (22)$$

а його тепловий контактний опір так:

$$r_{ce} = h/\kappa_a. \quad (23)$$

Для термоЕРС перехідного шару справедливе співвідношення:

$$\alpha_l = \frac{(\alpha_m/\kappa_m)v_m + (\alpha_s/\kappa_s)(1-v_m)}{v_m/\kappa_m + (1-v_m)/\kappa_s}. \quad (24)$$

Результати розрахунків температурних залежностей термоелектричних характеристик перехідного шару, отримуваних в разі рівномірного розподілу концентрації металу в ньому, наведено на рис. 8 – 15.

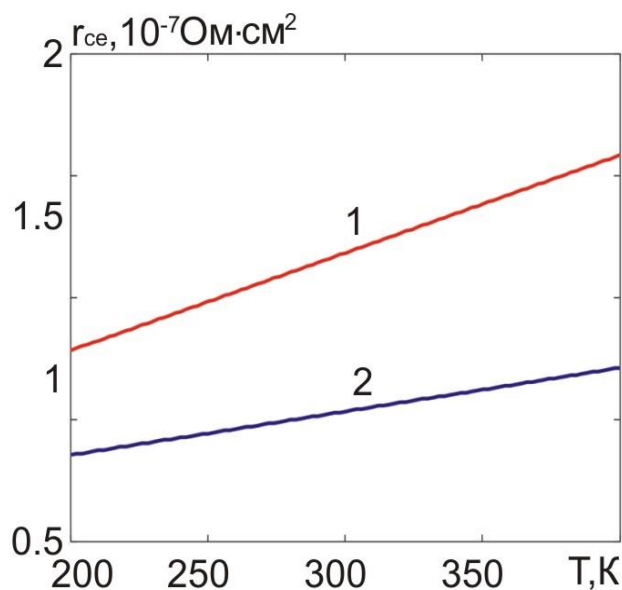


Рис. 8. Температурні залежності електричного контактного опору після вирівнювання концентрації металу за товщини перехідного шару, рівної 20 мкм: 1 – A=0; 2 – A=1.

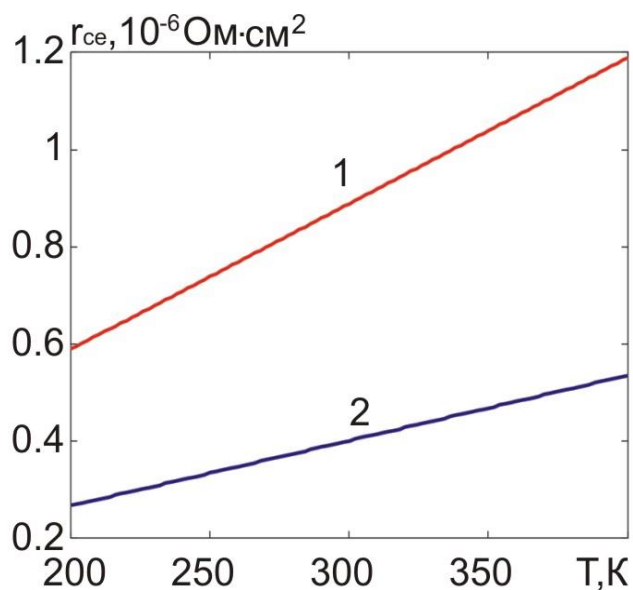


Рис. 9. Температурні залежності електричного контактного опору після вирівнювання концентрації металу за товщини перехідного шару, рівної 150 мкм: 1 – A=0; 2 – A=1.

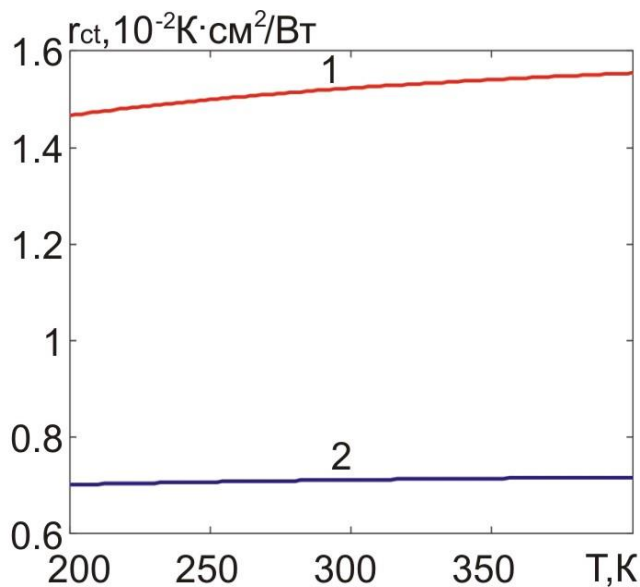


Рис. 10. Температурні залежності теплового контактного опору після вирівнювання концентрації металу за товщини перехідного шару, рівної 20 мкм: 1 – A=0; 2 – A=1.

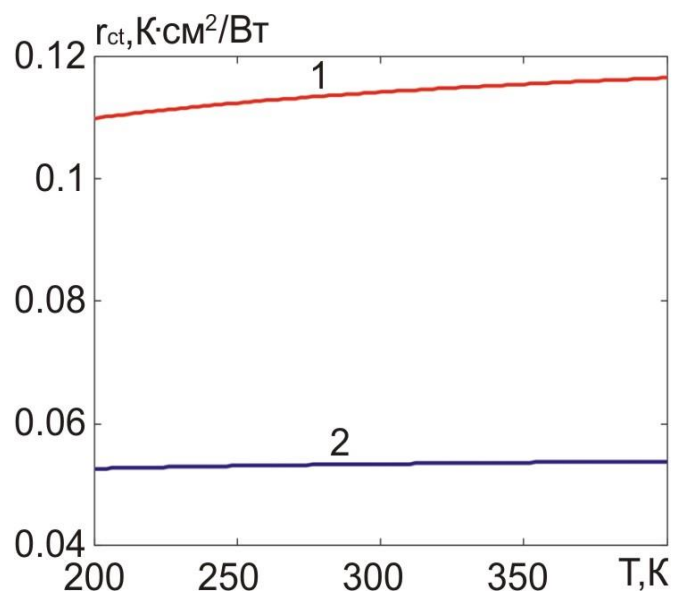


Рис. 11. Температурні залежності теплового контактного опору після вирівнювання концентрації металу за товщини перехідного шару, рівної 150 мкм: 1 – A=0; 2 – A=1.

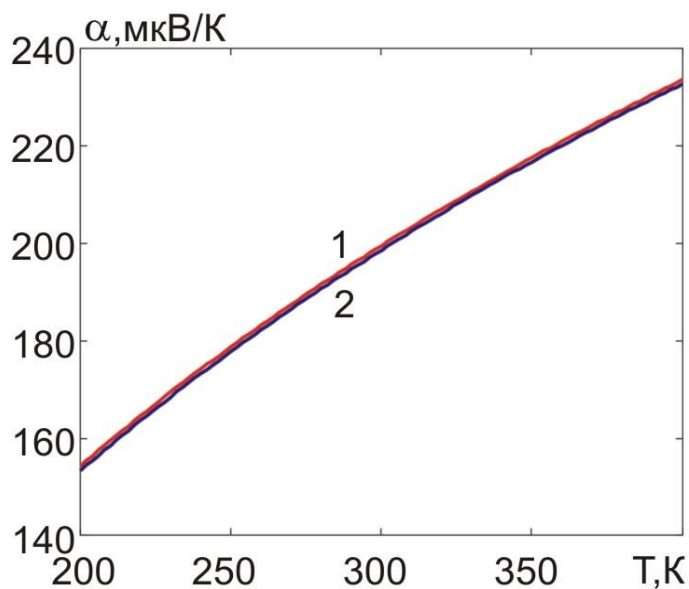


Рис. 12. Температурні залежності теплового контактного опору після вирівнювання концентрації металу за товщини перехідного шару, рівної 150 мкм: 1 – A=0; 2 – A=1.

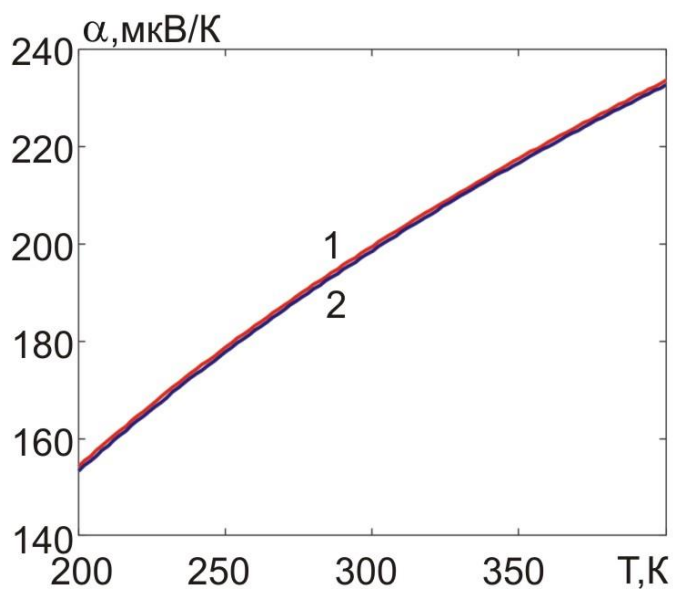


Рис. 13. Температурні залежності термоЕРС перехідного шару після вирівнювання концентрації металу:
1 – $A=0$; 2 – $A=1$.

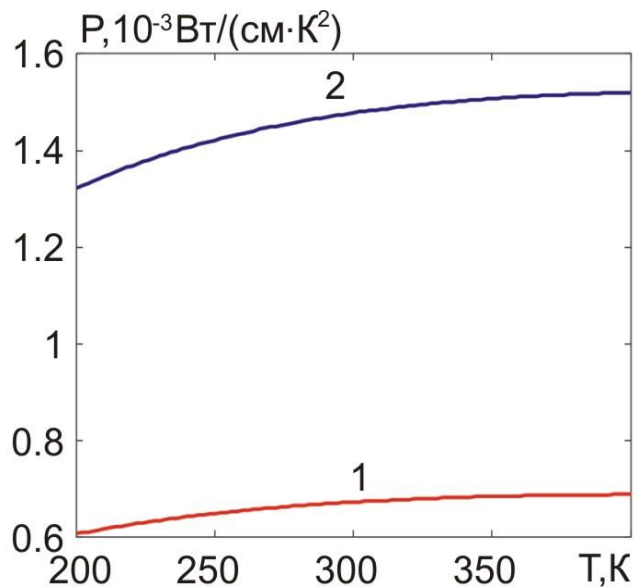


Рис. 14. Температурні залежності фактору потужності перехідного шару після вирівнювання концентрації металу:
1 – $A=0$; 2 – $A=1$

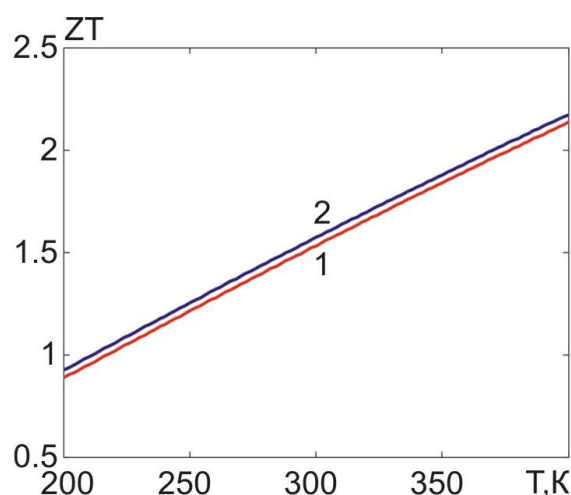


Рис. 15. Температурні залежності безрозмірної термоелектричної ефективності перехідного шару після вирівнювання концентрації металу:

$$1 - A=0; 2 - A=1.$$

З рисунків видно, що після вирівнювання концентрації металу в об'ємі перехідного шару електричний та тепловий контактні опори за всіх температур істотно знижуються, термоЕРС практично не змінюється, а фактор потужності та термоелектрична добротність істотно зростають. На відміну від випадку нерівномірного розподілу концентрації, після її вирівнювання у дослідженому інтервалі температур фактор потужності не має максимуму, а є зростаючою функцією температури.

Щодо впливу параметру A , тобто інтенсивності надходження металу у перехідний шар, на термоелектричні характеристики перехідного шару, то після вирівнювання концентрації зберігається та сама тенденція, що і за її нерівномірного розподілу.

В цілому у досліджених інтервалах температур, інтенсивності надходження металу у перехідний шар та товщин перехідного шару після вирівнювання концентрації металу електричний контактний опір змінюється від $8 \cdot 10^{-8}$ до $1.2 \cdot 10^{-6}$ Ом·см², тепловий контактний опір – від $7 \cdot 10^{-3}$ до 0.12 К·см²/Вт, термоЕРС – від 155 до 235 В/К, фактор потужності – від $6 \cdot 10^{-4}$ до $1.55 \cdot 10^{-3}$ Вт/(м·К²), безрозмірна термоелектрична ефективність – від 0.8 до 2.2. Таким чином, після вирівнювання концентрації електричний контактний опір спадає у 2.25 – 4 рази, тепловий контактний опір спадає у 3 рази, термоЕРС практично не змінюється, фактор потужності зростає у 3.75 – 5.3 рази, термоелектрична добротність зростає у 1.5 рази.

Зауважимо, що при проектуванні термоелектричних перетворювачів енергії такі параметри перехідних контактних шарів, як фактор потужності і термоелектрична добротність самостійного значення не мають, але вони можуть являти певний інтерес для інтегральної оцінки контактних структур.

Зрозуміло, що отримані результати можна вважати справедливими лише тоді, коли нікель не утворює інтерметалідів з телуридом вісмуту. Але у відповідності з даними праці [23] це, в основному, справджується.

Вплив контактного опору на ККД термоелектричного генераторного модуля.

Наведені температурні залежності електричного та теплового контактних опорів було використано для розрахунків ККД термоелектричних генераторних модулів з висотами термоелектричних гілок, які дорівнювали відповідно 3 та 1.5 мм. Розрахунки виконувались засобами об'єктно орієнтованого моделювання у програмному середовищі Comsol multiphysic.

Для цього розглядалась фізична модель термоелектричного генераторного модуля, зображена на рис. 16.

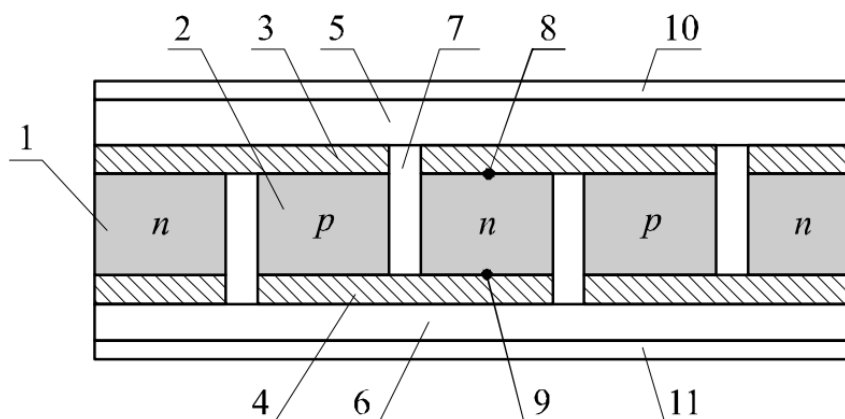


Рис. 16. Фізична модель термоелектричного генераторного модуля. 1 – вітка n-типу; 2 – вітка p-типу; 3, 4 – електричні комутації; 5, 6 – керамічні пластини; 7 – газ; 8, 9 – електричні контакти між вітками й комутаційними пластинами; 10 – тепловий контакт між керамічною пластинною й гарячим термостатом; 11 – тепловий контакт між керамічною пластинною й холодним термостатом.

Розподіл температури та електричного потенціалу в модулі визначався з системи диференціальних рівнянь відносно температури T та електрохімічного потенціалу U . Ці рівняння отримувались на основі закону збереження енергії, який можна подати у вигляді таких двох рівнянь:

$$\nabla \vec{w} = 0, \quad (25)$$

$$\vec{w} = \vec{q} + U\vec{j}. \quad (26)$$

У формулах (25) та (26) \vec{j} – густина електричного струму, \vec{q} – густина потоку тепла:

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T + \Pi \vec{j}, \quad (27)$$

де Π – коефіцієнт Пельтьє, κ – питома теплопровідність.

$$\Pi = \alpha T, \quad (28)$$

де α – коефіцієнт термоЕРС, T – температура.

Густина електричного струму знаходиться з рівняння

$$\vec{j} = -\sigma \nabla U - \sigma \alpha \nabla T, \quad (29)$$

де σ – питома електропровідність.

Підставивши (26), (27) у (25), отримаємо

$$-\nabla(\kappa \nabla T) + (\nabla \Pi + \nabla U)\vec{j} = 0. \quad (30)$$

З виразу (30), використавши (28) і (29), отримаємо наступне рівняння для знаходження розподілів температури та потенціалу:

$$-\nabla[(\sigma \alpha^2 T + \kappa) \nabla T] - \nabla(\sigma \alpha T \nabla U) - \sigma[(\nabla U)^2 + \alpha \nabla T \nabla U] = 0. \quad (31)$$

Для отримання другого рівняння скористаємось законом збереження електричного заряду:

$$\nabla \vec{j} = 0. \quad (32)$$

Підставивши (29) у (32), отримаємо таке рівняння:

$$\nabla(\sigma\alpha\nabla T) + \nabla(\sigma\nabla U) = 0. \quad (33)$$

Система (31), (33) є системою диференціальних рівнянь зі змінними коефіцієнтами другого порядку в частинних похідних, що описує розподіл температури й потенціалу в неоднорідному термоелектричному середовищі. Особливість системи рівнянь (31), (33) полягає в тому, що параметри α , σ , κ залежать від просторових координат x , y , z як безпосередньо, так і неявно через температуру $T(x, y, z)$. Це призводить до того, що стає неминучим застосування чисельних комп'ютерних методів для розв'язку рівнянь такого роду.

У комп'ютерній моделі термоелектричне поле описується двоелементною матрицею-стовпцем у функціональному просторі двічі диференційовних функцій, а саме координатних залежностей температури і потенціалу:

$$M = \begin{pmatrix} T(x, y, z) \\ U(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Матриця M задовольняє одному матричному диференціальному рівнянню

$$\nabla(c\nabla M) = f, \quad (35)$$

компонентами якого є рівняння (31) та (33), якщо матричні нелінійні коефіцієнти рівняння (35) мають вигляд

$$c = \begin{pmatrix} \sigma\alpha^2 T + \kappa & \sigma\alpha T \\ \alpha\sigma & \sigma \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} \sigma[(\nabla U)^2 + \nabla T \nabla U] \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Система рівнянь вигляду (35) при врахуванні (36) розв'язується для кожного з шарів, з яких складається термоелектричний модуль. Для цього додатково вводяться граничні умови неперервності температури, електричного потенціалу, теплового потоку та густини електричного струму на межах шарів. Окрім того з міркувань оптимальності умов, в яких працює термоелемент, і які визначаються з вимоги досягнення максимальної величини коефіцієнта корисної дії, задаються потенціали на комутаційних електродах та температури «гарячого» і «холодного» термостатів. Тому потенціали на комутаційних електродах однієї з гілок складають 0 та 0.0573 В, на другій – 0.0573 та 0.1146 В, а температури «холодного» та «гарячого» термостатів – 273 та 573 К відповідно.

Вплив електричного та теплового контактних опорів при цьому враховується у фізичній моделі в рамках двох підходів. Перший полягає в тому, що контактний шар не вводиться явним чином у фізичну модель, але його питома електропровідність та теплопровідність вважаються відомими з експерименту або, як у даному випадку, попередньо визначеними розрахунковим шляхом функціями температури. Тоді враховується пропорційність електричного та теплового контактних опорів до товщини шару. Другий підхід полягає в тому, що контактний шар із залежними від температури теплопровідністю та електропровідністю з урахуванням його товщини в явному вигляді вводиться у фізичну модель. ТермоЕРС контактного шару на даному етапі досліджень не враховується.

Такий математичний опис фізичної моделі дає можливість розв'язати описану вище систему рівнянь для температури і потенціалу у середовищі мультифізичного моделювання Comsol Multiphysics. Результатами розв'язання рівняння (11) є тривимірні температурне й електричне поля в заданій геометрії термоелектричного модуля. Їх приклади для одного термоелемента, який входить до складу модуля з висотою гілки 3 мм, зображено на рис. 17, 18. Знаючи ці поля, легко розрахувати основні енергетичні характеристики модуля.

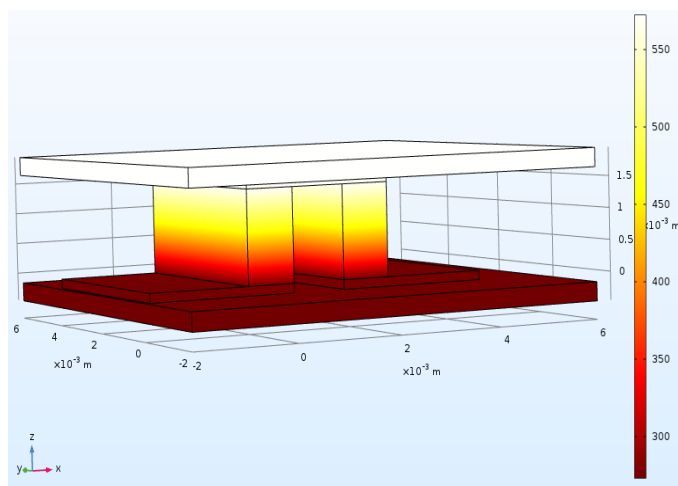


Рис. 17. Температурне поле у термоелементі

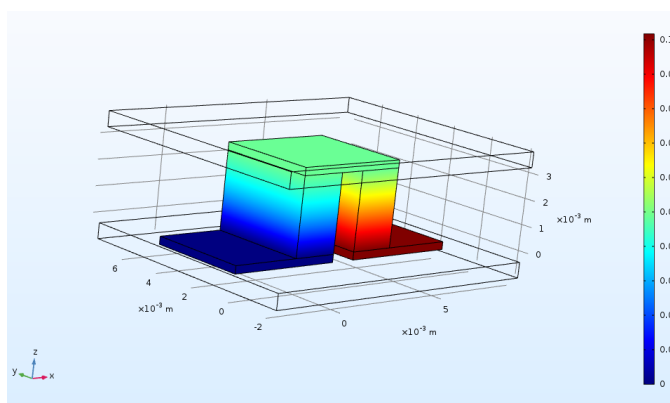


Рис. 18. Розподіл електричного потенціалу у термоелементі

Результати цих розрахунків наведено на рис.19 – 22.

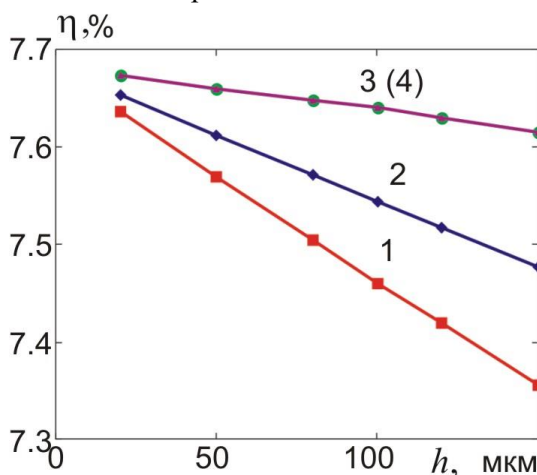


Рис. 19. Залежність ККД генераторного модуля з висотою гілки 3 мм від товщини перехідного шару для випадку, коли контактний опір вважається зосередженим параметром: 1 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 2 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 3 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний; 4 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний

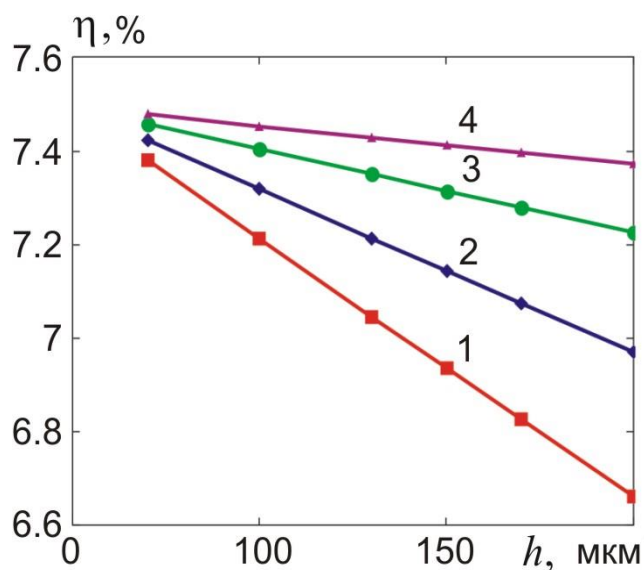


Рис. 20. Залежність ККД генераторного модуля з висотою гілки 1.5 мм від товщини перехідного шару для випадку, коли контактний опір вважається зосередженим параметром: 1 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 2 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 3 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний; 4 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний

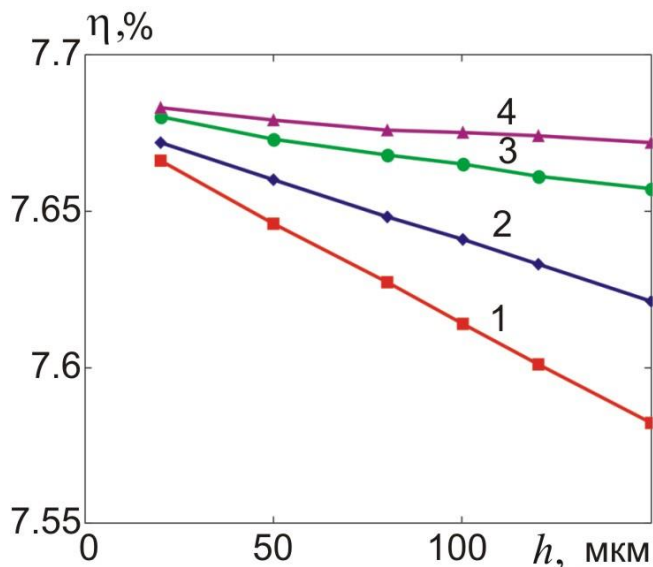


Рис. 21. Залежність ККД генераторного модуля з висотою гілки 3 мм від товщини перехідного шару для випадку, коли перехідний шар явно вводиться у модель: 1 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 2 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 3 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний; 4 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний

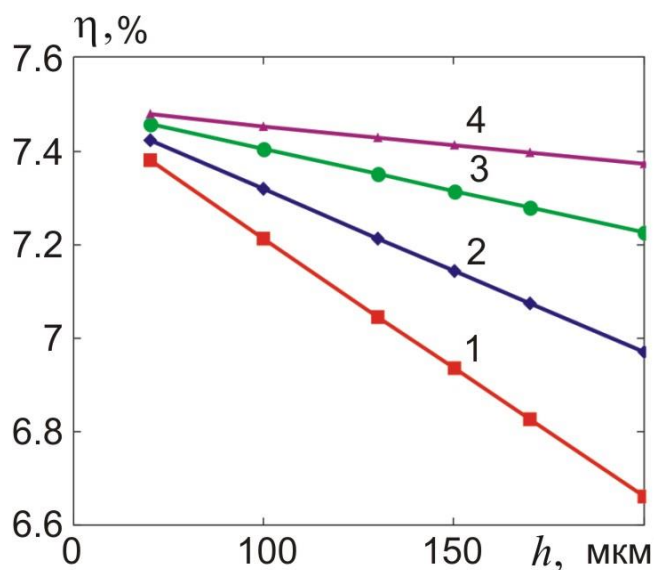


Рис. 22. Залежність ККД генераторного модуля з висотою гілки 1.5 мм від товщини перехідного шару для випадку, коли перехідний шар явно вводиться у модель: 1 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 2 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі нерівномірний; 3 – $A=0$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний; 4 – $A=1$, розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний

Зауважимо, що у даному випадку термоЕРС перехідного шару вважалась рівною нулеві.

З рисунків видно, що ККД термоелемента у режимі генерування електричної енергії є найбільшим, коли розподіл атомів металу у перехідному шарі рівномірний. Окрім того, за інших рівних умов, він тим більший, чим більша інтенсивність джерела, з якого метал надходить у перехідний шар. У випадку нерівномірного розподілу атомів металу у перехідному шарі ККД спадає зі зростанням товщини перехідного шару тим сильніше, чим менша висота термоелектричної гілки. В цілому у розглянутому інтервалі висот термоелектричних гілок та товщин шарів ККД змінюється від 6.4 до 7.7 % у випадку, коли контактний шар явно вводиться в модель, та від 6.6 до 7.7 % у випадку, коли контактний опір вважається зосередженим параметром. У випадку, коли перехідний шар вводиться в модель, ККД після вирівнювання розподілу атомів металу у перехідному шарі слабо залежить від інтенсивності джерела, з якого відбувається стаціонарна дифузія металу у ТЕМ.

Висновки

1. Без урахування утворення кластерів у перехідному шарі розрахунковим шляхом отримано температурні залежності електричного та теплового контактних опорів, термоЕРС, фактору потужності та термоелектричної добротності перехідних контактних шарів телуриду вісмуту – нікель у припущенні, що розсіювання носіїв заряду у напівпровіднику і металі відбувається на деформаційному потенціалі акустичних фононів, теплопровідність металу визначається електронним газом, а ґраткова теплопровідність напівпровідника – розсіюванням фононів одного на одному з перекиданням. При цьому вважалось, що нікель не утворює нових фаз з телуридом вісмуту.
2. Показано, що як за нерівномірного так і за рівномірного розподілу атомів металу у перехідному шарі електричний та тепловий контактні опори, термоЕРС та безрозмірна термоелектрична

ефективність перехідного шару є зростаючими функціями температури та інтенсивності надходження атомів металу у перехідний шар під час створення контакту.

3. Фактор потужності у дослідженому інтервалі температур є зростаючою функцією інтенсивності надходження атомів металу у перехідний шар, і в той же час має максимум на температурній залежності у разі нерівномірного розподілу атомів металу у перехідному шарі, однак стає монотонно зростаючою функцією температури в разі вирівнювання розподілу концентрації атомів металу у перехідному шарі.
4. В разі нерівномірного розподілу атомів металу в інтервалі температур 200 – 400 К, інтенсивності надходження атомів металу у перехідний шар, яка відповідає зміні параметру A від 0 до 1 та інтервалі товщин перехідного шару від 20 до 150 мкм електричний контактний опір змінюється від $1.8 \cdot 10^{-7}$ до $4.8 \cdot 10^{-6}$ Ом·см², тепловий контактний опір – від 0.022 до 0.35 К·см²/Вт, термоЕРС – від 155 до 235 мкВ/К, фактор потужності – від $1.6 \cdot 10^{-4}$ до $2.9 \cdot 10^{-4}$ Вт/(м·К²), безрозмірна термоелектрична ефективність – від 0.55 до 1.7.
5. В разі вирівнювання розподілу концентрації атомів металу у перехідному шарі електричний контактний опір спадає у 2.25 – 4 рази, тепловий контактний опір спадає у 3 рази, термоЕРС практично не змінюється, фактор потужності зростає у 3.75 – 5.3 рази, термоелектрична добротність зростає у 1.5 рази у порівнянні з випадком нерівномірного розподілу.
6. Дослідження впливу перехідного контактного шару без кластерів на ККД термоелемента у режимі генерації показали, що за інших рівних умов, якщо вплив термоЕРС перехідного шару не береться до уваги, у розглянутому інтервалі висот термоелектричних гілок та товщин шарів у випадку, коли контактний шар явно вводиться в модель, ККД змінюється від 6.4 до 7.7%. Коли ж контактний опір вважається, зосередженим параметром, ККД змінюється від 6.6 до 7.7%. У випадку, коли перехідний шар вводиться в модель, ККД після вирівнювання розподілу атомів металу у перехідному шарі слабо залежить від інтенсивності джерела, з якого відбувається стаціонарна дифузія металу у ТЕМ, в той час, як у випадку, коли контактний опір вважається зосередженим параметром, ця залежність істотно сильніша.

Література

1. D.K. Aswal, R. Basu, A. Singh, Key issues in development of thermoelectric power generators: high figure-of-merit materials and their highly conducting interfaces with metallic interconnects, *Energy Convers. Manag.* 114 (2016) 50-67. [http://refhub.elsevier.com/S2468-6069\(18\)30133-3/sref1](http://refhub.elsevier.com/S2468-6069(18)30133-3/sref1)
2. Анатычук Л.И., Кузь Р.В. Энергетические и экономические показатели термоэлектрических генераторных модулей на основе *Bi-Te* для рекуперации отходов тепла. // *Термоэлектричество*. – 2012. – №4. – С. 75-82.
3. И.А. Дабкин, В.Б. Освенский, А.И. Сорокин, В.П. Панченко, О.Е. Нарожная. Контактное сопротивление в составных термоэлектрических ветвях. *ФТП*, 2017, т.51, вып.8, с.1038-1040.
4. Анатычук Л.И. *Термоэлектричество. Том 2. Термоэлектрические преобразователи энергии*. Киев, Черновцы, Институт термоэлектричества, 2003.
5. Semenyuk V. Thermoelectric Micro Modules for Spot Cooling of High Density Heat Sources / V. Semenyuk // *20th International Conference on Thermoelectrics: proceedings – 2001.* – P.391-396.
6. Semenyuk V.A. Thermoelectric Cooling of Electro-Optic Components/ V. A. Semenyuk // *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano*. – 2006. – P.58-1 – 58-20. (Edited by D.M. Rowe, CRC Taylor&Francis).
7. Fleuriel J.-P. *Solid-State Power Generation and Cooling Microdevices For Distributed System*

- Architectures/ J.-P. Fleurial, G.J. Snyder, J. Patel [et al] // 20th International Conference on Thermoelectrics: proceedings. – 2001. – P.24-29.
8. Harald Bottner, Joachim Nurnus, Axel Schubert, Miniaturized Thermoelectric Converters, in: Thermoelectrics Handbook, Macro to Nano., Edited by D.M. Rowe, CRC Taylor&Francis, 2006, P.46-1 – 46-18.
9. Crane N. B. Self-Assembly for Integration of Microscale Thermoelectric Coolers/ N. B. Crane. P. Mishra, J. L. Murray Jr., G.S. Nolas // Journal of Electronic Materials. – 2009. – Vol. 38, No.7 – P.1252-1256.
10. I-Yu Huang, Development of low-cost micro-thermoelectric coolers utilizing MEMS technology / I-Yu Huang, Jr-Ching Linb, Kun-Dian She [et al] // Sensors and Actuators. – 2008. – Vol. A 148. – P.176–185.
11. Navone C. Development of (Bi,Sb)₂(Te,Se)₃-Based Thermoelectric Modules by a Screen-Printing Process / C. Navone, M. Soulier, M. Plissonnier, A.L. Seiler // Journal of Electronic Materials. – 2010. – Vol. 39, No. 9. – P.1755-1759.
12. Goncalves L.M. Thermoelectric micro converters for cooling and energy-scavenging systems/ L.M. Goncalves, C. Couto, P. Alpuim, J. H. Correia // J. Micromech. Microeng. – 2008 –Vol.18, 064008. – P.1-5.
13. Misra P. Test Facility for simultaneous measurement of electrical and thermal contact resistance/ P. Misra, J. Nagaraju // Rev. Sci. Instr. – 2004. –Vol.75. –P.2625-2630 (doi 10.1063/1.1775316).
14. Maheshappa H.D. A facility for electrical contact resistance measurement/ H.D. Maheshappa, J. Nagaraju, N.V. KrishnaMurthu // Rev. Sci. Instr. – 1998. –Vol.69. – P.1534-1539 (doi 10.1063/1.1148810).
15. Deepak. Measurement of small specific contact resistance of metals with resistive semiconductors / Deepak, H. Krishna // J. El. Mat. – 2007. –Vol. 36. – P.598-605 (doi 10.1007/s11664-007-0091-y).
16. Gupta R.P. Practical contact resistance measurement method for bulk Bi₂Te₃ based thermoelectric devices/ R.P. Gupta, R. McCarty, J. Sharp // J. El. Mat. – 2014. – Vol.43, Is.6. – P.1608-1612.
17. Y. Kim, G. Yoon, S. H. Park Direct Contact Resistance Evaluation of Thermoelectric Legs. Experimental Mechanics, (2016) v.56 N5: 861-869. <https://doi.org/10.1007/s11340-016-0131-8>
18. Алиева Т.Д., Бархалов Б.Ш., Абдинов Д.Ш. Структура и электрические свойства границ раздела кристаллов Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te₃ и Bi₂Te_{2.7}Se₃ с некоторыми сплавами // Неорганические материалы. – 1995. – Т.31. – №2. – С.194-198.
19. Джамалов, Н.А., Бархалов Б.Ш., Салаев Э.Ю., Гасанов Н.А., Абдинов Д.Ш. Неорганические материалы, 1983, т.19, №4, с.593-595.
20. Алиева Т.Д., Ахундова Н.М., Джамалов Н.А. и др. Доклады Академии наук Азербайджанской ССР, 1985, т.41, №12, с.18-20.
21. G.D. Kuznetsov, Y.G. Polystanskiy, V.A. Evseev. The metallization of the thermoelement branches by ionic sputtering of the nickel and cobalt / G.D. Kuznetsov, Y.G. Polystanskiy, V.A. Evseev // XIV international conference on thermoelectrics. Proceedings. June 27-30, 1995. – St. Petersburg-1995. – P.166-167.
22. Астахов М.В., Бублик В.Т., Каратаев В.В. и др. Влияние процесса никелирования на структуру и адгезионные свойства поверхностных слоев термоэлектрического материала (ТЭМ) на основе халькогенидов Bi и Sb. Сб. "Термоэлектрики и их применение", Санкт-Петербург, 2004, с.243-248.
23. Бублик В.Т., Воронин А.И., Пономарев В.Ф., Табачкова Н.Ю. Изменение структуры приконтактной области термоэлектрических материалов на основе теллурида висмута при повышенных температурах // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2012. – №2. – С.17-20.
24. Белоногов Е.А., Дыбов В.А., Костюченко А.В. и др. Конденсированные среды и межфазные

- граници, том 19, №4, с.479-488.
25. Rahul P. Gupta, K. Xiong, J. B. White, Kyeongjae Cho, H. N. Alshareef, B. E. Gnade. Low Resistance Ohmic Contacts to Bi₂Te₃ Using Ni and Co Metallization. *Journal of the Electrochemical Society*, **157** (6), H666-H670, 2010. DOI: 10.1149/1.3385154
 26. Ngan Hoang Pham, Nader Farahi, Hasbuna Kamila, Aryan Sankhla, Sahar Ayachi, Eckhard Müller, Johannes de Boor. Ni and Ag electrodes for magnesium silicide based thermoelectric generators. *Materials Today Energy* 11 (2019) 97e105. <https://doi.org/10.1016/j.mtener.2018.10.016>.
 27. Никирса Д.Д. Физические особенности микроминиатюризации полупроводниковых охлаждающих термоэлементов. Диссертация канд. тех. наук, Черновцы, 1987.
 28. Bartkowiak M., Mahan G.D. Heat and electricity transport through interfaces, in: *Recent Trends in Thermoelectric Materials, vol. II, Semiconductors and Semimetals*, vol. 70, Academic Press, New York, 2001, P. 245-271.
 29. Sze S.M., *Semiconductor Devices - Physics and Technology*, John Wiley & Sons, 1985.
 30. Гольдберг Ю.А. Омический контакт метал-полупроводник АПВВ: методы создания и свойства. ФТП, т.28, вып.10, 1994, с.1681-1698.
 31. Da Silva, L. W., Kaviani, M. Microthermoelectric Cooler: Interfacial Effects on Thermal and Electrical Transport, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47, N 10-11, 2004, P. 2417–2435.
 32. Anatychuk L.I. Contact resistance between metal and thermoelectric material / L.I. Anatychuk, V.K. Dugaev, V.I. Litvinov, V.L. Volkov // *Journal of Thermoelectricity*. – 1994. – No 1. – P.70-77.
 33. Гольцман Б.М. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi₂Te₃ / Б.М. Гольцман, И.А. Кудинов, И.А. Смирнов. – М.: Наука – 1972. – 322с.
 34. Лифшиц Е.М. Физическая кинетика. / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. // М.: Наука – 1979. – 528 с.

Надійшла до редакції 17.04.2019

Горский П.В.^{1,2}, *док. физ.-мат. наук*^{1,2}
Мыцканюк Н.В.^{1,2}

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

²Черновицкий национальный университет
имени Юрия Федьковича, ул. Коцюбинського 2
Черновцы, 58012, Украина

О ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЯХ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ МАТЕРИАЛ-МЕТАЛЛ БЕЗ УЧЕТА ЯВЛЕНИЯ ПЕРКОЛЯЦИИ

Расчетным путем получены основные соотношения, определяющие температурные зависимости термоэлектрических характеристик переходных контактных слоев термоэлектрический материал-металл без учета теории протекания. Конкретные количественные результаты и графики

температурних залежностей електричного і теплового контактних опорів, термоЕДС, фактора потужності і безрозмірної термоелектричної ефективності приведені для контактної пари телурид висмута - нікель. Установлено, що в разі нерівномірного розподілу атомів металу в інтервалі температур 200 - 400 К, інтенсивності поступлення атомів металу в перехідний шар, який відповідає зміні розподілу атомів металу по товщині перехідного шару від лінійного до квадратичного в інтервалі товщин перехідного шару від 20 до 150 мкм електричне контактне опір змінюється від $1.8 \cdot 10^{-7}$ до $4.8 \cdot 10^{-6}$ Ом·см², теплове контактне опір - від 0.022 до 0.35 К·см²/Вт, термоЕДС - від 155 до 235 мкВ/К, фактор потужності - від $1.6 \cdot 10^{-4}$ до $2.9 \cdot 10^{-4}$ Вт/(м·К²), безрозмірна термоелектрична ефективність - від 0.55 до 1.7. Бібл. 34, рис. 21.

Ключевые слова: контакт термоелектричний матеріал - метал, приконтактний перехідний шар, електричне контактне опір, теплове контактне опір, термоЕДС, фактор потужності, безрозмірна термоелектрична ефективність, температурні

Gorskyi P.V. *dok. Phys.-mat. Sciences*^{1,2},
Mytskaniuk N.V.^{1,2}

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1, Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine;

²Yu.Fedkovych Chernivtsi National University,
2, Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

ON THE TEMPERATURE DEPENDENCES OF THERMOELECTRIC CHARACTERISTICS OF THERMOELECTRIC MATERIAL-METAL TRANSIENT LAYER WITHOUT REGARD TO PERCOLATION EFFECT

The basic relationships are obtained by calculation, which determine the temperature dependences of thermoelectric characteristics of thermoelectric material-metal transient contact layers without regard to percolation theory. Specific quantitative results and plots of the temperature dependences of the electrical and thermal contact resistances, the thermoEMF, the power factor, and the dimensionless thermoelectric figure of merit are given for bismuth telluride – nickel contact pair. It has been established that with uneven distribution of metal atoms in the temperature range of 200 - 400 K, the intensity of metal atoms entering transient layer, which corresponds to a change in the distribution of metal atoms by the thickness of transient layer from linear to square and the thickness range of transient layer from 20 to 150 μm, the electrical contact resistance varies from $1.8 \cdot 10^{-7}$ to $4.8 \cdot 10^{-6}$ Ohm·cm², the thermal contact resistance - from 0.022 to 0.35 K·cm²/W, the thermoEMF - from 155 to 235 μV/K, the power factor - from $1.6 \cdot 10^{-4}$ to $2.9 \cdot 10^{-4}$ W/(m·K²), the dimensionless thermoelectric figure of merit - from 0.55 to 1.7. Bibl. 34, Fig 21.

Key words: thermoelectric material-metal contact, near-contact transient layer, electrical contact resistance, thermal contact resistance, thermoEMF, power factor, dimensionless thermoelectric figure of merit, temperature dependences.

References

1. Aswal D.K., Basu R., Singh A. (2016). Key issues in development of thermoelectric power generators: high figure-of-merit materials and their highly conducting interfaces with metallic interconnects. *Energy Convers. Manag.*, 114, 50-67. [http://refhub.elsevier.com/S2468-6069\(18\)30133-3/sref1](http://refhub.elsevier.com/S2468-6069(18)30133-3/sref1)

2. Anatyshuk L.I., Kuz R.V. (2012). The energy and economic parameters of *Bi-Te* based thermoelectric generator modules for waste heat recovery. *J. Thermoelectricity*, 4, 75-82.
3. Drabkin I.A., Osvensky V.B., Sorokin A.I., Panchenko V.P., Narozhnaya O.E. (2017). Contact resistance in composite thermoelectric legs. *Semiconductors*, 51(8), 1038-1040.
4. Anatyshuk L.I. (2003). *Termoelektrichestvo. Tom 2. Termoelektricheskiie preobrazovateli energii [Thermoelectricity. Vol.2. Thermoelectric power converters]*. Kyiv, Chernivtsi: Institute of Thermoelectricity [in Russian].
5. Semenyuk V. (2001). Thermoelectric micro modules for spot cooling of high density heat sources. *Proc. of 20th International Conference on Thermoelectrics*, 391-396.
6. Semenyuk V.A. (2006). Thermoelectric cooling of electro-optic components. *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano*, 58-1 – 58-20. D.M. Rowe (Ed.). CRC Taylor&Francis.
7. Fleurial J.-P., Snyder G.J., Patel J., et al. (2001). Solid-state power generation and cooling microdevices for distributed system architectures. *Proc of 20th International Conference on Thermoelectrics*, 24-29.
8. Bottner Harald, Nurnus Joachim, Schubert Axel (2006). Miniaturized thermoelectric converters. *Thermoelectrics Handbook, Macro to Nano*. D.M. Rowe (Ed.). CRC Taylor&Francis, 46-1 – 46-18.
9. Crane N. B., Misra P., Murray Jr. J.L., Nolas G.S. (2009). Self-assembly for integration of microscale thermoelectric coolers. *Journal of Electronic Materials*, 38 (7), 1252-1256.
10. I-Yu Huang, Jr-Ching Linb, Kun-Dian She (2008). Development of low-cost micro-thermoelectric coolers utilizing MEMS technology. *Sensors and Actuators*, A 148, 176–185.
11. Navone C., Soulier M., Plissonnier M., Seiler A.L. (2010). Development of $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Te,Se})_3$ -based thermoelectric modules by a screen-printing process. *Journal of Electronic Materials*, 39 (9), 1755-1759.
12. Goncalves L.M., Couto C., Alpuim P., Correia J.H. (2008). Thermoelectric micro converters for cooling and energy-scavenging systems. *J. Micromech. Microeng.*, 18, 064008, 1-5.
13. Misra P., Nagaraju J. (2004). Test facility for simultaneous measurement of electrical and thermal contact resistance. *Rev. Sci. Instr.*, 75, 2625-2630 (doi 10.1063/1.1775316).
14. Maheshappa H.D., Nagaraju J., KrishnaMurthu N.V. (1998). A facility for electrical contact resistance measurement. *Rev. Sci. Instr.*, 69, 534-1539 (doi 10.1063/1.1148810).
15. Deepak, Krishna H. (2007). Measurement of small specific contact resistance of metals with resistive semiconductors. *J. El. Mat.*, 36, 598-605 (doi 10.1007/s11664-007-0091-y).
16. Gupta R.P., McCarty R., Sharp J. (2014). Practical contact resistance measurement method for bulk Bi_2Te_3 based thermoelectric devices. *J. El. Mat.*, 43 (6), 1608-1612.
17. Kim Y., Yoon G., Park S.H. (2016). Direct contact resistance evaluation of thermoelectric legs. *Experimental Mechanics*, (2016) v.56 N5: 861-869. <https://doi.org/10.1007/s11340-016-0131-8>
18. Alieva T.D., Barkhalov B.Sh., Abdinov D.Sh. (1995). Структура і електричні властивості гранітних розділів кристалів $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ і $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_3$ з деякими сплавами [Structure and electrical properties of interfaces between $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ and $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_3$ crystals with certain alloys]. *Neorganicheskiie Materialy – Inorganic Materials*, 31 (2), 194-198.
19. Dzhamalov N.A., Barkhalov B.Sh., Salaiev E.Yu., Gasanov N.A., Abdinov D.Sh.(1983). *Neorganicheskiie Materialy – Inorganic Materials*, 19(4), 593-595.
20. Alieva T.D., Akhundova N.M., Dzhamalov N.A., et al. (1985). *Reports of the Academy of Sciences of Azerbaijan SSR*, 41(12), 18-20.
21. Kuznetsov G.D., Polystanskiy Y.G., Evseev V.A. (1995). The metallization of the thermoelement branches by ionic sputtering of the nickel and cobalt. *Proc of the XIV International Conference on Thermoelectrics (St.Petersburg, June 27-30, 1995)* (p.166-167).
22. Astakhov M.V., Bublik V.T., Karataiev V.V., et al. (2004). Vliianie protsessa nikelirovaniia na struk-

- туру і адhesionnyie svoistva poverkhnostnykh sloiov termoelektricheskogo materiala na osnove khalkogenidov Bi і Sb. [The influence of nickel plating process on the structure and adhesion properties of surface layers of thermoelectric material based on Bi and Sb chalcogenides]. In: *"Thermoelectrics and their Application"* (Saint-Petersburg, 2004) (p.243-248).
23. Bublik V.T., Voronin A.I., Ponomarev V.F., Tabachkova N.Yu. (2012). Izmeneniie struktury prikontaknoi oblasti termoelektricheskikh materialov na osnove telluride vismuta pri povyshennykh temperaturakh [Change in the structure of near-contact area of thermoelectric materials based on bismuth telluride at elevated temperatures]. *Izvestiia vysshykh uchebnykh zavedenii. Materaily Elektronnoi Tekhniki - News of Higher Educational Institutions. Materials of Electronic Technique*, 2, 17-20 [in Russian].
 24. Belonogov E.A., Dybov V.A., Kostiuchenko A.V., et al. Kondensirovannyye sredy i mezhfaznyie granitsy [Condensed media and interphase boundaries], Vol.19, №4, p.479-488.
 25. Gupta Rahul P., Xiong K., White J.B., Cho Kyeongjae, Alshareef H.N., Gnade B.E. (2010). Low resistance ohmic contacts to Bi₂Te₃ using Ni and Co metallization. *Journal of the Electrochemical Society*, 157 (6), H666-H670, 2010. DOI: 10.1149/1.3385154
 26. Ngan Hoang Pham, Nader Farahi, Hasbuna Kamila, Aryan Sankhla, Sahar Ayachi, Eckhard Müller, Johannes de Boor (2019). Ni and Ag electrodes for magnesium silicide based thermoelectric generators. *Materials Today Energy*, 11 97e105. <https://doi.org/10.1016/j.mtener.2018.10.016>.
 27. Nikirsa D.D. (1987). Fizicheskiye osobennosti mikrominiaturizatsii polyprovodnikovyykh okhlazhdaiushchikh termoelementov [Physical features of microminiaturization of semiconductor cooling thermoelements]. Candidate's thesis (Tech.sciences). Chernivtsi [in Russian].
 28. Bartkowiak M., Mahan G.D. (2001). Heat and electricity transport through interfaces, in: *Recent Trends in Thermoelectric Materials, vol. II, Semiconductors and Semimetals*, vol. 70. New York: Academic Press.
 29. Sze S.M. (1985). *Semiconductor Devices - Physics and Technology*, John Wiley & Sons.
 30. Goldberg Yu.A. (1994). Ohmic contact metal-semiconductor АІІІВV: creation methods and properties. *Semiconductors*, 28(10), 1681-1698.
 31. Da Silva L.W., Kaviani M. (2004). Microthermoelectric cooler: interfacial effects on thermal and electrical transport. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(10-11), 2417–2435.
 32. Anatyshuk L.I., Dugaev V.K., Litvinov V.I., Volkov V.L. (1994). Contact resistance between metal and thermoelectric material. *J. Thermoelectricity*, 1, 70-77.
 33. Goltsman B.M., Kudinov I.A., Smirnov I.A. (1972). *Poluprovodnikovyye termoelektricheskiye materaily na osnove Bi₂Te₃* [Semiconductor thermoelectric materials based on Bi₂Te₃]. Moscow: Nauka [in Russian].
 34. Lifshits E.M., Pitaevskii L.P. (1979). *Fizicheskaya kinetika* [Physical kinetics]. Moscow: Nauka [in Russian].

Submitted 17.04.2019

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.

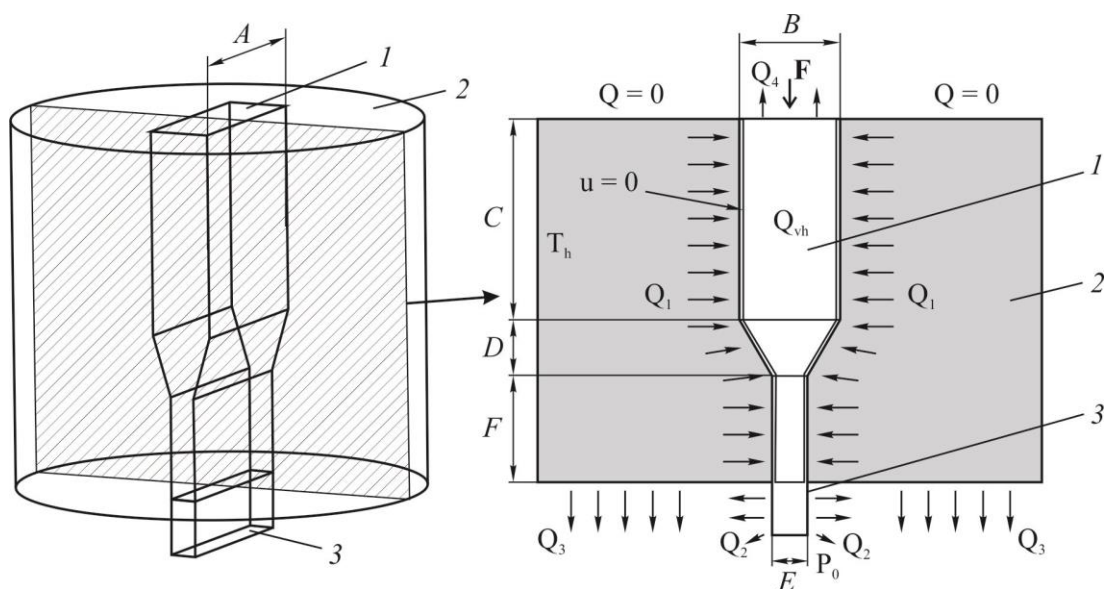


Рис. 1. Фізична модель процесу екструзії стрічкового термоелектричного матеріалу.
1 – заготовка термоелектричного матеріалу; 2 – матриця; 3 – стрічковий термоелектричний матеріал після виходу з матриці.

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: $p = p_0 = 1$ 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.

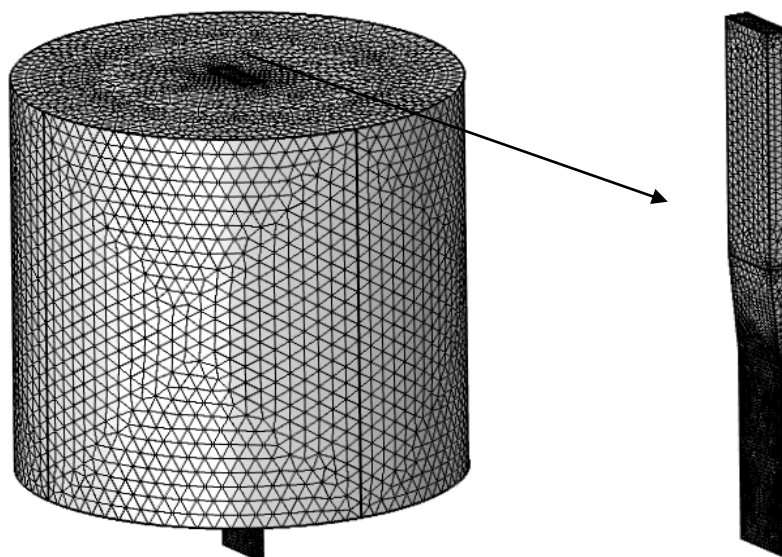


Рис. 2. Сітка скінчених елементів, побудована для конфігурації матриці, наведеної на рис. 1.

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.

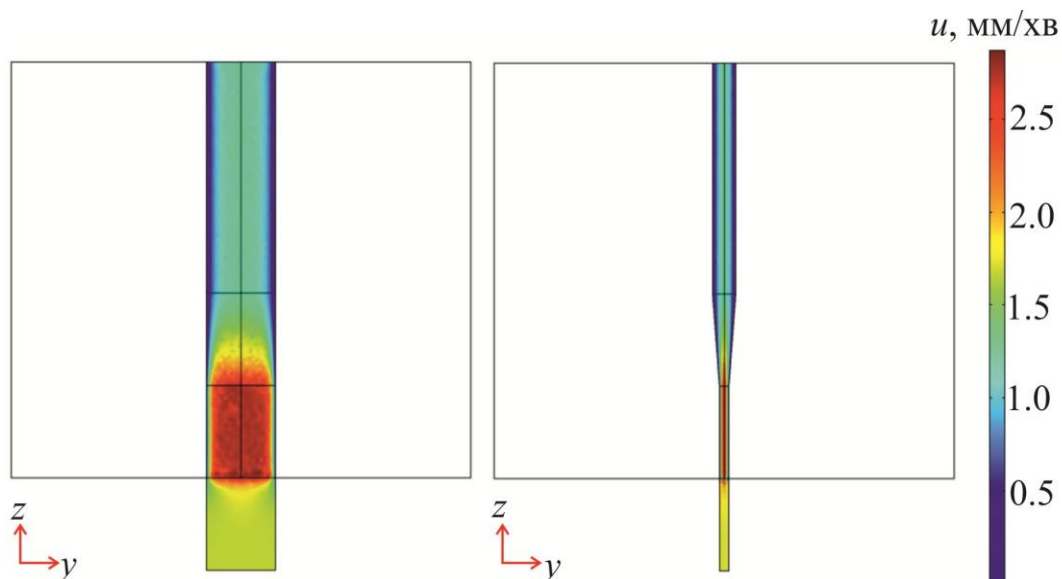


Рис. 3. Поле швидкості термоелектричного матеріалу всередині матриці та після виходу з неї (для матриці розмірами: $A = 15\text{ мм}$; $B = 5\text{ мм}$; $C = 50\text{ мм}$; $D = 20\text{ мм}$; $E = 2\text{ мм}$; $F = 20\text{ мм}$).

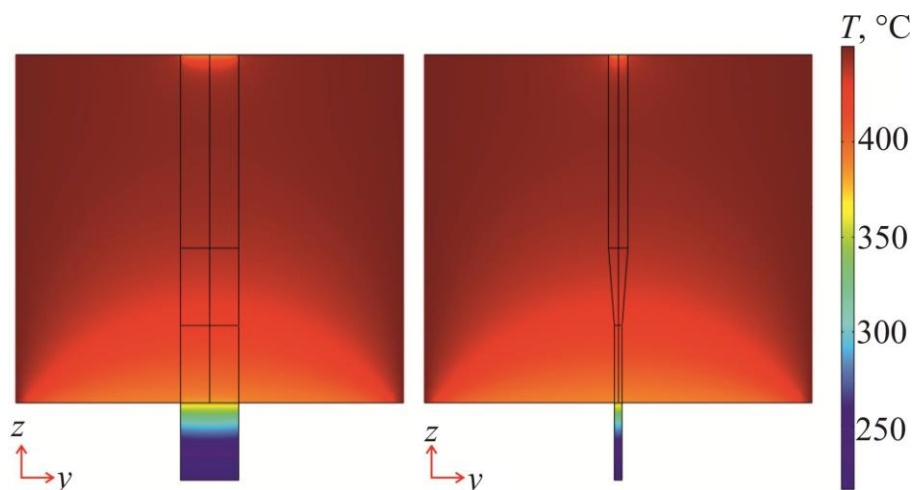


Рис. 3. Розподіли температур у термоелектричному матеріалі та матриці (для матриці розмірами: $A = 15$ мм; $B = 5$ мм; $C = 50$ мм; $D = 20$ мм; $E = 2$ мм; $F = 20$ мм).

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).

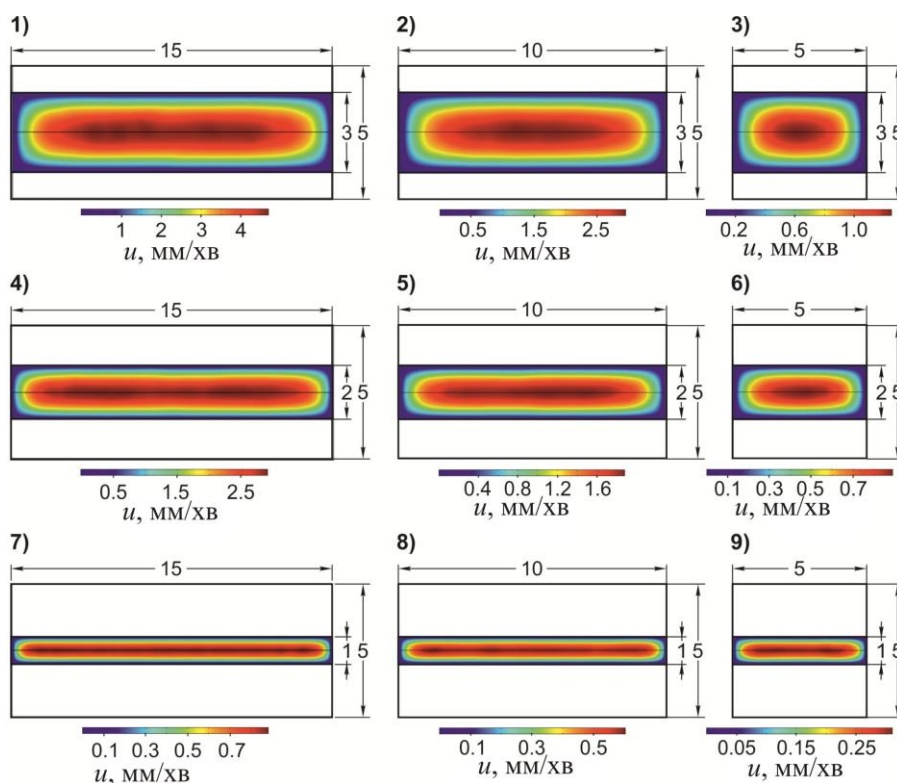


Рис. 4. Поля швидкостей у термоелектричному матеріалі на виході з матриці, отримані для різної конфігурації матриці. 1 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 2 – $A = 10$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 3 – $A = 5$ мм, $B = 5$ мм, $E = 3$ мм; 4 – $A = 15$ мм, $B = 5$ мм, $E = 2$ мм; 5 – $A = 10$ мм, $B =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

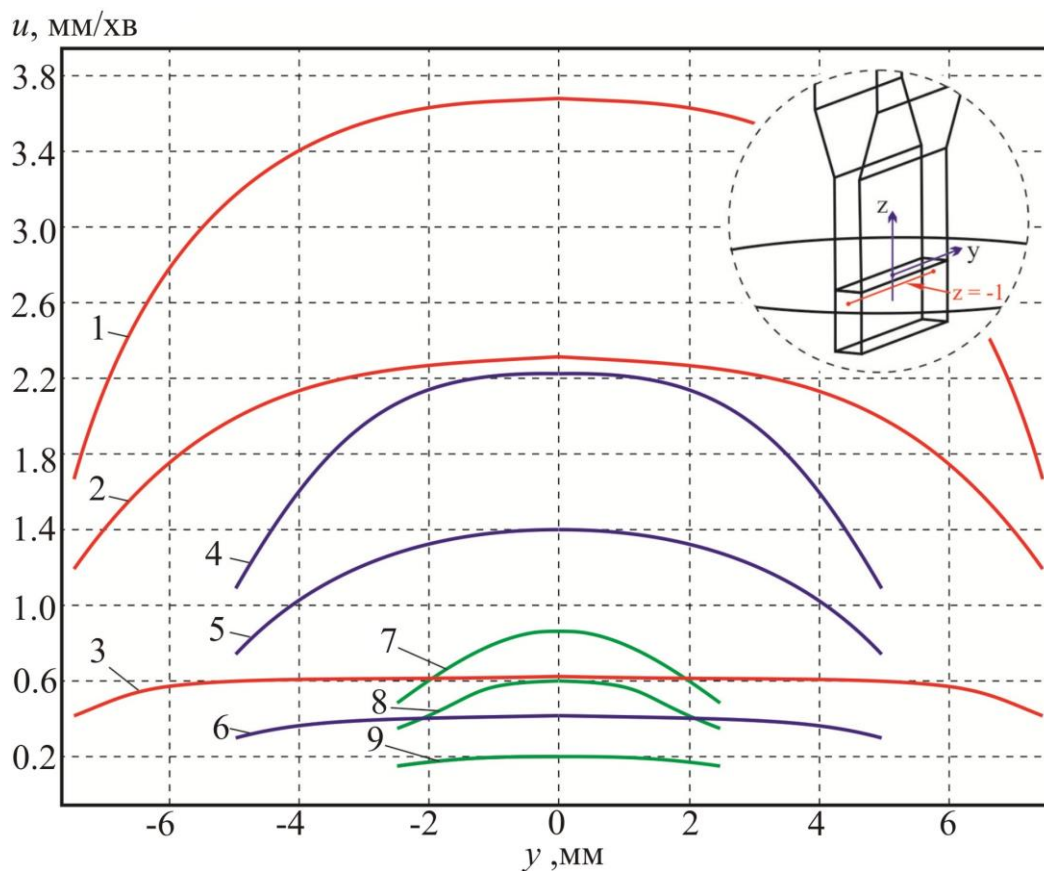


Рис. 5. Розподіли швидкостей по ширині вихідного стрічкового термоелектричного матеріалу (через 1 мм після виходу з матриці) для різної геометрії матриці.

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, Kotsiubynskiy 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). Teoreticheskoe 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

УДК 536.24



Анатичук Л.І.

Анатичук Л.І. *акад. НАН України*^{1,2}
Ніцович О.В. *канд. физ.-мат. наук*^{1,2}

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

²Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, 58000, Україна



Ніцович О.В.

КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ЕФЕКТУ ПЕЛЬТЬЄ НА ПРОЦЕС КРИСТАЛІЗАЦІЇ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ Bi_2Te_3

У статті наведено результати комп'ютерного моделювання процесу вирощування термоелектричних матеріалів на основі Bi_2Te_3 методом вертикальної зонної плавки з врахуванням ефекту Пельтьє, що виникає на межі розділу твердої та рідкої фаз вирощуваного матеріалу при пропусканні через злиток електричного струму. Бібл. 7, рис. 6, табл. 1.

Ключові слова: моделювання, вертикальна зонна плавка, термоелектричний матеріал, вирощування в електричному полі.

Вступ

Тверді розчини на основі телуриду вісмуту - це унікальні комерційно доступні термоелектричні матеріали (ТЕМ) для твердотільного охолодження та генерації електричної енергії. Тому вдосконаленню методів отримання ТЕМ на основі Bi_2Te_3 приділяється багато уваги.

Зонне плавлення є одним із найбільш використовуваних методів виробництва напівпровідникових матеріалів, зокрема термоелектричних. Однак, отримання термоелектричних матеріалів з необхідними властивостями можливе лише в умовах контрольованого процесу кристалізації, оскільки при отриманні ТЕМ даним методом великий вплив на стійкість зростання та однорідність монокристала має кривизна фронту кристалізації, температурний градієнт на межі розділу твердої та рідкої фаз, геометрія зони розплаву, швидкість переміщення зони та інше. У роботах [1 – 3] розглядалася можливість вирощування монокристалів термоелектричних матеріалів методом вертикальної зонної плавки при наявності електричного струму, що проходить через злиток. Відомо, що при проходженні струму на границі твердої та рідкої фаз одного і того ж напівпровідника, як і на границі двох різних матеріалів, буде виділятися або поглинатися тепло Пельтьє. Цієї кількості тепла достатньо, щоб вплинути на хід кристалізації. Однак, дослідження розподілів температур та геометрії фронту кристалізації викликають істотні експериментальні труднощі, тому актуальним є моделювання процесу вирощування ТЕМ, що дає можливість оптимізувати вибір технологічних параметрів установки та режимів вирощування матеріалу.

Отже, метою даної роботи є комп'ютерне дослідження впливу ефекту Пельтьє, що виникає на межі розділу твердої та рідкої фаз при вирощуванні термоелектричних матеріалів на основі Bi_2Te_3 методом вертикальної зонної плавки (ВЗП) з пропусканням постійного електричного струму через

розплавлену зону, на процес вирощування, зокрема, на форму фронту кристалізації та градієнти температур.

Фізична модель процесу вертикальної зонної плавки зі струмом

Фізична модель вирощування монокристалів на основі Bi_2Te_3 методом вертикальної зонної плавки представлена на рис. 1.

На рисунку зображено фрагмент злитка, що включає полікристалічний матеріал 2, розплавлену зону 6 та монокристал 3. Злиток поміщено в кварцову ампулу 1. За допомогою нагрівача 7 та системи охолоджувачів 8, формується розплавлена зона 6, яка, переміщуючись разом з нагрівачем вздовж зразка, забезпечує плавлення полікристалу та кристалізацію розплаву нижче границі 5, яку називають фронтом кристалізації.

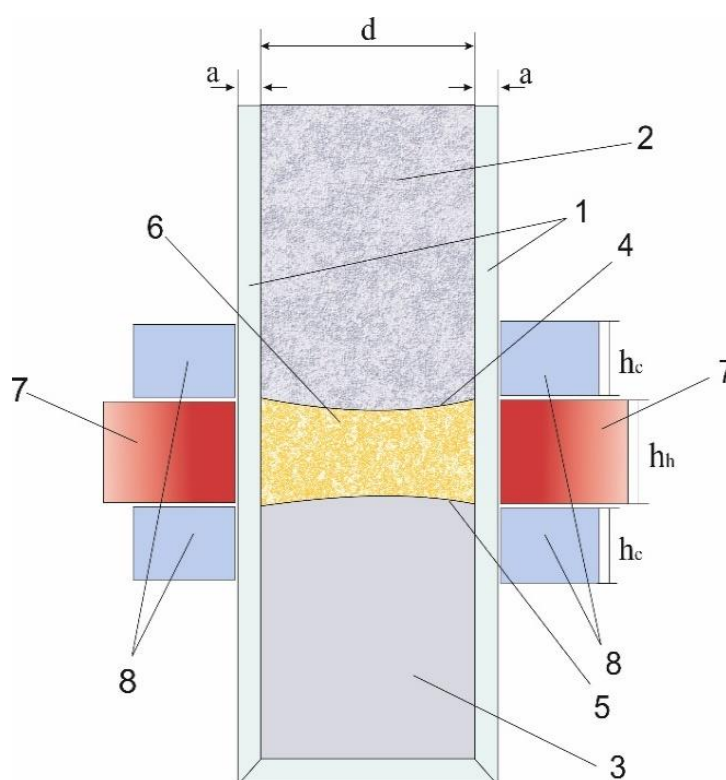


Рис.1. Фізична модель установки вирощування ТЕМ методом вертикальної зонної плавки: 1 – кварцова ампула, 2 – матеріал в твердій фазі(полікристал), 3 – матеріал в твердій фазі(монокристал), 4 – границя фронту розплаву, 5 – границя фронту кристалізації, 6 – матеріал в рідкій фазі(зона розплаву), 7 – нагрівник, 8 – охолоджувачі.

При моделюванні зонного вирощування розглядався стаціонарний режим, тобто рух теплового вузла, що включає нагрівник 7 та охолоджувачі 8, не враховувався. Відомо, що кристали на основі телуриду вісмуту вирощують зі швидкістю 1.5-2.5 см/год, оцінивши час, необхідний системі для досягнення теплової рівноваги, що навіть при грубих розрахунках становив 40 с, було визначено, що за цей час пічка зміститься лише на 0.2 мм. Втрати тепла на даній ділянці будуть на два порядки меншими за тепло, що передається від теплового вузла ампулі. Таким чином, цими втратами можна знехтувати при комп'ютерному моделюванні, оскільки вони мало вплинуть на загальний розподіл температур.

Математична модель процесу вирощування ТЕМ методом вертикальної зонної плавки зі струмом

При моделюванні процесу теплопровідності в однорідному середовищі з фазовим переходом в програмному комплексі COMSOL Multiphysics розв'язується класична система нестационарних диференціальних рівнянь теплопровідності доповнена залежностями фізичних властивостей досліджуваного твердого тіла, як функції від фазового стану в даній точці при даній температурі, з врахуванням тепла Джоуля – Ленца та термоелектричних ефектів [3]:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \nabla T + \nabla q = Q + Q_e \quad (1)$$

$$q = -\kappa \Delta T + Pj, \quad (2)$$

$$Q_e = jE \quad (3)$$

тут

$$j = \sigma E + j_e, \quad (4)$$

$$j_e = -\sigma \alpha \nabla T, \quad (5)$$

$$P = \alpha T, \quad (6)$$

$$E = -\nabla U, \quad (7)$$

$$\rho = \theta \rho_{phase1} + (1 - \theta) \rho_{phase2}, \quad (8)$$

$$C_p = \frac{1}{2} \left(\theta \rho_{phase1} C_{p, phase1} + (1 - \theta) \rho_{phase2} C_{p, phase2} \right) + L \frac{d\alpha_m}{dT}, \quad (9)$$

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \cdot \frac{(1 - \theta) \rho_{p, phase1}}{\theta \rho_{p, phase1} + (1 - \theta) \rho_{p, phase2}}, \quad (10)$$

$$\kappa = \theta \kappa_{phase1} + (1 - \theta) \kappa_{phase2}. \quad (11)$$

де ρ – густина, кг/м³; C_p – теплоємність матеріалу при постійному тиску, Дж/(моль·К); κ – теплопровідність, Вт/(см·К), u – швидкість руху середовища, м/с, в досліджуваній задачі рівна нулю; T – температура, К; U – електричний потенціал, В; E – напруженість електричного поля, В/м; α – коефіцієнт термоерс, мкВ/К; σ – електропровідність, (Ом·см)⁻¹; t – час, с; θ – співвідношення фаз при даній температурі; α_m – масове відношення між фазами; L – прихована теплота фазового переходу, Дж/кг; Q – зовнішній тепловий потік, Вт. Індеси *phase1* та *phase2* показують до якої фази відносяться властивості, тверда фаза чи рідка, відповідно.

Для моделювання впливу електричного поля на, на верхній та нижній границях злитку задаються наступні граничні умови:

$$U|_{z=0} = U_0, U|_{z=l} = 0. \quad (11)$$

На зовнішніх стінках нагрівника та охолоджувачів задавалася умова теплоізоляції:

$$-n \cdot (-\kappa \nabla T) = 0. \quad (12)$$

На зовнішній стінці кварцової ампули задається гранична умова у вигляді функції:

$$-n \cdot (-\kappa \nabla T) = h(T_{ext} - T) + \varepsilon \sigma_b (T_{ext}^4 - T^4), \quad (13)$$

де T_{ext} – температура навколишнього середовища, К; T – температура стінки кварцової ампули, К; n – вектор напрямлений по нормалі до поверхні циліндра (ампули); ε – коефіцієнт випромінювання

кварцу; σ_b – стала Стефана-Больцмана, Вт/(м²·К⁴); h – коефіцієнт тепловіддачі, Вт/(м²·К), який виражається формулою [4]:

$$h = \begin{cases} \frac{k}{l} \left(0,68 + \frac{0,67 Ra_l^{1/4}}{\left(1 + \left(\frac{0,492 k}{\mu C_p}\right)^{9/16}\right)^{4/9}} \right), \text{ якщо } Ra_l \leq 10^9 \\ \frac{k}{l} \left(0,825 + \frac{0,38 Ra_l^{1/6}}{\left(1 + \left(\frac{0,492 k}{\mu C_p}\right)^{9/16}\right)^{8/27}} \right), \text{ якщо } Ra_l > 10^9 \end{cases},$$

тут Ra_l – число Релея, що визначається наступним виразом:

$$Ra_l = \frac{g \alpha_p \rho^2 C_p (T - T_{ext}) l^3}{\mu \kappa},$$

де g – прискорення вільного падіння, м/с²; α_p – температурний коефіцієнт об'ємного розширення, К⁻¹; l – довжина шару повітря, м; μ – динамічна в'язкість, (Па·с).

Щоб врахувати особливості фазових переходів при нагріванні-охолодженні Bi_2Te_3 термоелектричні властивості ТЕМ були задані в залежності від температури, відповідно до даних, отриманих в [5]. Конвекція та перенесення маси розплавленого Bi_2Te_3 в даній моделі не враховувалися.

Результати комп'ютерного моделювання

Нижче наведено результати комп'ютерного моделювання впливу ефекту Пельтьє на процес кристалізації телуриду вісмуту методом ВЗП при наявності електричного струму, відповідно до фізичної моделі зображеної на рис. 1. В табл. 1 зазначено деякі вхідні параметри моделі.

Таблиця 1

Вхідні дані, що використовувалися при моделюванні

	$T, ^\circ\text{C}$	ε	$C_p, \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$	$\rho, \text{ г}/\text{см}^3$	Ліквідус та солідус, $^\circ\text{C}$
Bi_2Te_3	-	-	59.73-126.19	7.74	585-530
Кварц	-	0.9-0.41	-	-	-
Нагрівник	700-820	0,8	-	7,0	-
Охолоджувач	30	-	-	-	-

Діаметр d вирощуваного кристалу приймався рівним 24 мм, висота нагрівача обиралася оптимальною і, як зазначалося в роботі [6], повинна бути рівною $h_n = 3 \cdot d$. Висота охолоджувачів $h_c = 1/2 \cdot d$, відстань між кварцовою трубкою та нагрівачем, а також нагрівачем і охолоджувачами становив 2мм. Для моделювання впливу електричного поля на процес вирощування, на верхній та нижній границях матеріалу задавалася різниця потенціалів.

Результати моделювання показали, що при пропусканні через розплавлену зону електричного струму, на одній із поверхонь розділу фаз поглинається, а на іншій, відповідно, виділяється тепло Пельтьє (рис.2). Це пояснюється тим, що границі розділу твердої та рідкої фаз одного і того ж матеріалу є місцем різкої зміни властивостей даного ТЕМ.

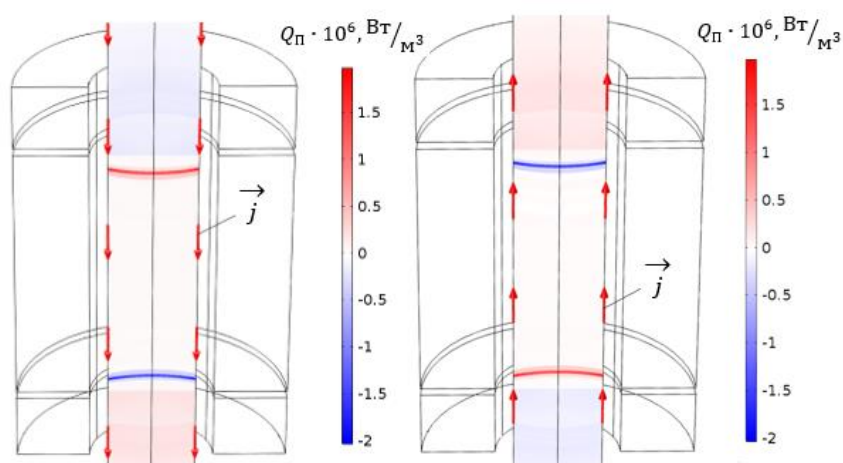


Рис. 2. Виділення та поглинання тепла Пельтьє на границях розділу твердої та рідкої фаз в залежності від напрямку пропускання струму

Як видно з рис. 2, тепло Пельтьє є додатною величиною, коли струм проходить з твердої фази в рідку і навпаки, коли струм тече з рідкої фази в тверду, тепло Пельтьє поглинається.

Важливе значення для формування структурно однорідного кристалу під час вирощування має форма фронту кристалізації, який може бути увігнутим, плоским або опуклим [6-7]. На увігнутій поверхні в розплав, біля стінок контейнера легко з'являються паразитні зародки. Така форма фронту сприяє виникненню напружень, усадочних раковин і нерівномірного розподілу домішок по перетину вирощуваного кристалу. Опукла поверхня розділу перешкоджає росту випадкових зародків, що утворюються поблизу стінок контейнера, але чим більша швидкість росту, тим імовірніше утворення паразитних зародків і, тим меншим повинен бути радіус кривизни поверхні розділу. Плоска поверхня розділу зводить до мінімуму виникнення в кристалі напружень та сприяє рівномірному розподілу домішок по перетину кристалу. Тому є важливим створення плоского фронту кристалізації (рис.3, б).

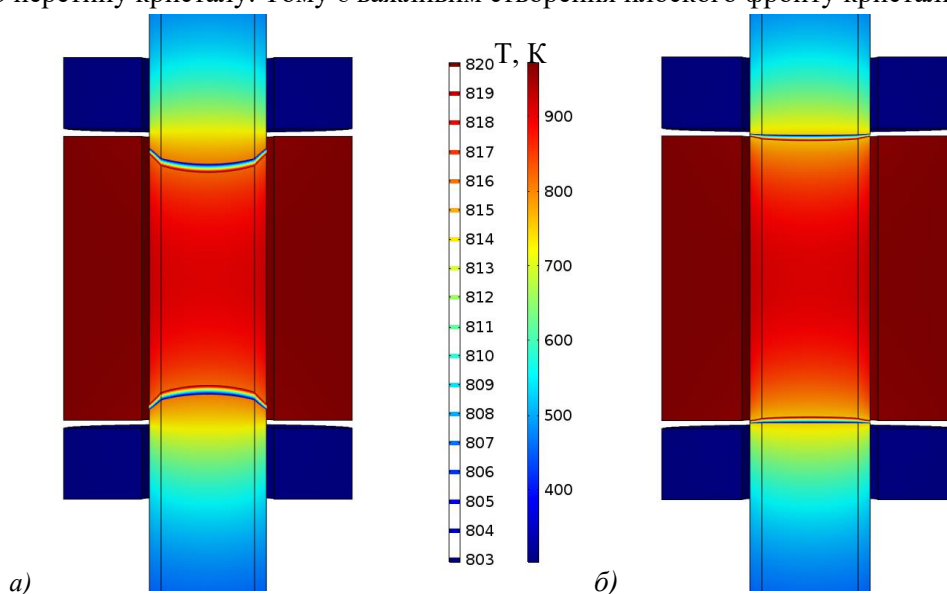


Рис. 3. Вид фронту кристалізації для різних температур нагрівника при $j = 0.5 \cdot 10^5 \text{ A/m}^2$: а) $T_h = 973 \text{ K}$; б) $T_h = 1063 \text{ K}$

На рис.4 показано залежність величини кривизни k фронту кристалізації від температури нагрівника при різній густині струму, що пропускається через розплавлену зону. Кривизна розраховувалася, як $k = z_{max} - z_{min}$ вздовж фронту.

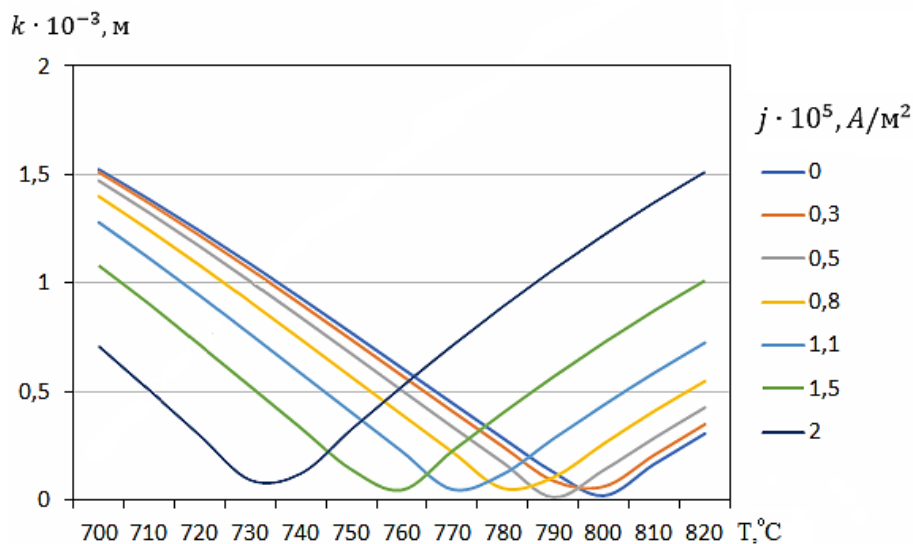


Рис. 4. Залежність величини кривизни k фронту кристалізації від температури нагрівника при різній щільності струму

Як видно з рис.4, при заданій конфігурації установки, без пропускання електричного струму, плоский фронт кристалізації досягався при температурах 790-800 $^\circ\text{C}$. Змінюючи величину густини струму від 0.3 до $2 \cdot 10^5 \text{ А/м}^2$ можна досягти плоского фронту при менших температурах нагрівника.

Залежність величини градієнта температур вздовж фронту кристалізації від напрямку пропускання струму показано на рис.5. В даному випадку температура нагрівника $T_h = 785^\circ\text{C}$, густина струму $j = 0,5 \cdot 10^5 \text{ А/м}^2$.

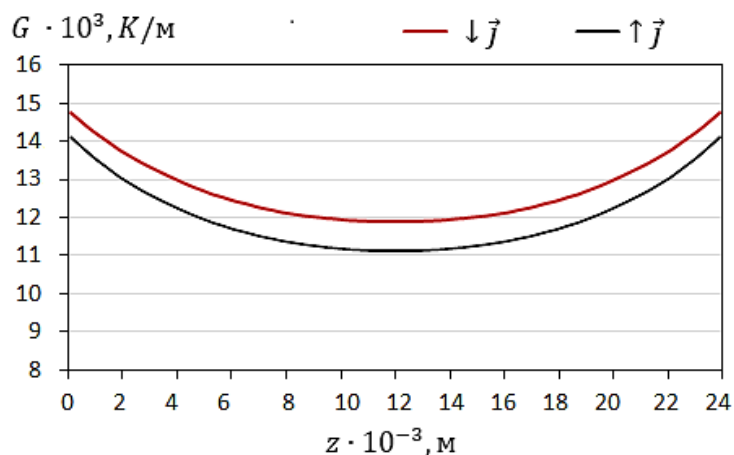


Рис.5. Залежність величини радіального градієнту температур G від напрямку пропускання струму

Використання ефекту Пельтьє при зонному вирощуванні з пропусканням постійного електричного струму ускладнюється тим, що в твердій та рідкій фазах одночасно виділяється і тепло Джоуля-Ленца, що посилює ефект Пельтьє на фронті розплаву та послаблює його на фронті кристалізації.

На рис. 6. показано залежність величини радіального градієнту температур G від температур нагрівника для різної густини струму, що пропускається через розплавлену зону.

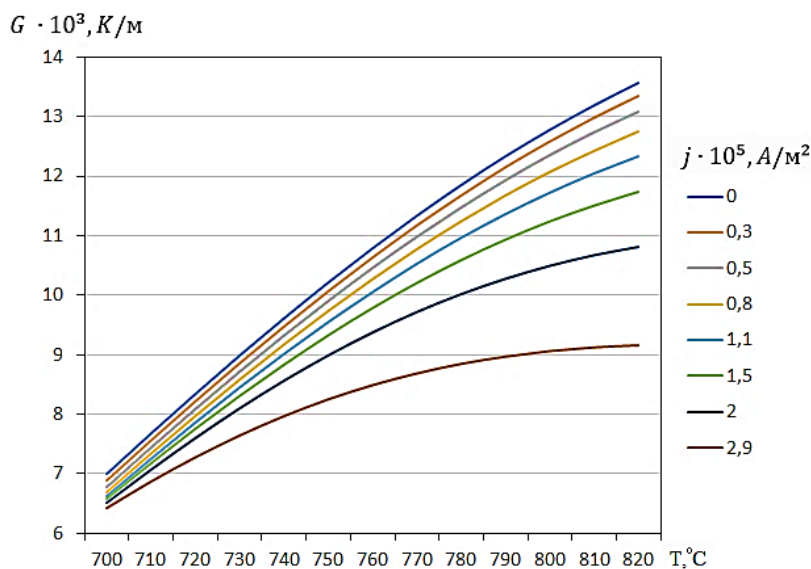


Рис.5. Залежність величини радіального градієнту температур G від температур нагрівника для різної густини струму

З цих результатів витікає, що за рахунок збільшення тепла Джоуля-Ленца, градієнт температур на фронті кристалізації при збільшенні величини струму зменшується.

Висновки

1. Розроблено методику комп'ютерного моделювання процесу вирощування ТЕМ на основі Bi_2Te_3 методом вертикальної зонної перекристалізації з пропусканням через зразок електричного струму.
2. Підтверджено можливість керування розподілом температур в злитку під час вирощування ТЕМ методом ВЗП за рахунок пропускання електричного струму через розплавлену зону та виникнення ефекту Пельтьє на межі розділу твердої та рідкої фаз.
3. Визначено оптимальні значення температур нагрівача та величин струму, що забезпечують утворення плоского фронту кристалізації.

Література

1. Пфан У.Г. Зонная плавка // Под.ред. В.Н.Вигдоровича. М.: Мир. – 1970. – 336с.
2. Гольцман Б.М. Кристаллизация в электрическом поле термоэлектрических материалов на основе теллурида висмута. / Гольцман Б.М., Лященко В.И., Стрекопытова Н.И. //Термоэлектрические источники тока: материалы, конструкция, применение. Тезисы докладов всесоюзного совещания. – Ашхабад. – 1986.
3. Liaschenok V.I. Influence of electric current flow during crystallization process on thermoelectric properties of materials / Liaschenok V.I., Strekopytova N.I. // XIV International Conference of Thermoelectrics. – 1995. – P.112-114.

4. Incropera F.P. Fundamentals of Heat and Mass Transfer. 6th Edition / Incropera F.P., DeWitt D.P., Bergman T.L., Lavine A.S. // John Wiley & Sons Ltd., New York. – 2007. – 1070 p.
5. Ніцович О.В. Комп'ютерне моделювання процесу кристалізації Bi_2Te_3 при наявності електричного струму // Термоелектрика. - №5. – с.12-21. – 2018.
6. Ніцович О.В. Дослідження умов формування плоского фронту кристалізації при вирощуванні термоелектричного матеріалу на основі Bi_2Te_3 методом вертикальної зонної плавки // Термоелектрика. - №3. – с.76-82. – 2018.
7. Вильке К.-Т. Выращивание кристаллов. - Л. Изд-во "Недра". – 1977. – 600 с.

Надійшла до редакції 01.05.2019

Анатичук Л.І., *акад. НАН України*^{1,2}

Ніцович О.В., *канд. физ.-мат. наук*^{1,2}

¹Інститут термоелектричності НАН і МОН України, ул. Науки, 1,
Черновці, 58029, Україна, *e-mail: anatyck@gmail.com;*

²Черновицький національний університет
ім. Юрія Федьковича, ул. Коцюбинського, 2,
Черновці, 58012, Україна

КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭФФЕКТА ПЕЛЬТЬЕ НА ПРОЦЕСС КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ Bi_2Te_3

В статье приведены результаты компьютерного моделирования процесса выращивания термоэлектрических материалов на основе Bi_2Te_3 методом вертикальной зонной плавки с учетом эффекта Пельтье, который возникает на границе раздела твердой и жидкой фаз выращиваемого материала при пропускании через слиток электрического тока. Библиография: 7, рис. 6, табл. 1.

Ключевые слова: моделирование, вертикальная зонная плавка, термоэлектрический материал, выращивание в электрическом поле.

L.I. Anatyckuk, *acad. of the NAS of Ukraine*^{1,2},

O.V. Nitsovych *cand. phys.–math. sciences*^{1,2}

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

²Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
2 Kotsiubynsky str., Chernivtsi, 58012, Ukraine;

COMPUTER RESEARCH ON THE INFLUENCE OF THE PELTIER EFFECT ON THE CRYSTALLIZATION PROCESS OF

***Bi*₂*Te*₃ BASED THERMOELECTRIC MATERIALS**

The article presents the results of computer simulation of the process of growing Bi₂Te₃ based thermoelectric materials by the vertical zone melting method with regard to the Peltier effect occurring at the interface between solid and liquid phases of the grown material when electric current is passed through an ingot. Bibl. 7, Fig. 6, Tabl. 1.

Key words: simulation, vertical zone melting, thermoelectric material, growing in electric field.

References

1. Pfan U.G. (1970). *Zonnaya plavka [Zone melting]*. V.N.Vigdorovich (Ed.). Moscow: Mir [in Russian].
2. Goltsman B.M., Liaschenok V.I., Strekopytova N.I. (1986). Kristallizatsiia v elektricheskom pole termoelektricheskikh materialov na osnove telluride vismuta [Crystallization in electrical field of thermoelectric materials based on bismuth telluride]. In: *Termoelektricheskiie istochniki toka: materailly, konstruksiiia, primeneniie. Tezisy dokladov vsesoiuznogo soveshchaniia - Thermoelectric current sources: materials, design, application. Abstracts of All-Union Conference reports. Ashgabad* [in Russian].
3. Liaschenok V.I., Strekopytova N.I. (1995). Influence of electric current flow during crystallization process on thermoelectric properties of materials. *Proc. of XIV International Conference of Thermoelectrics (1995)*, 112-114.
4. Incropera F.P., DeWitt D.P., Bergman T.L., Lavine A.S. (2007). *Fundamentals of heat and mass transfer*. 6th Ed. New York: John Wiley & Sons Ltd.
5. Nitsovych O.V. (2018). Computer simulation of Bi₂Te₃ crystallization process in the presence of electric current. *J.Thermoelectricity*, 5, 12-21.
6. Nitsovych O.V. (2018). Research on the conditions of forming a flat crystallization front when growing Bi₂Te₃ based thermoelectric material by vertical zone melting method. *J.Thermoelectricity*, 3, 76-82.
7. Vilke K.T. (1977). *Metody vyrashchivaniia kristallov [Methods of crystal growth]*. Leningrad: Nedra [in Russian].

Submitted 01.05.2019

УДК 537

Анатичук Л.І., *акад. НАН України*^{1,2}
Микитюк П.Д., *канд. фіз.-мат. наук*^{1,2}
Микитюк О.Ю., *канд. фіз.-мат. наук, доцент*³

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

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

³Вищий державний навчальний заклад України
«Буковинський державний медичний університет»,
Театральна площа, 2, Чернівці, 58012, Україна

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО ДЖЕРЕЛА СТРУМУ З КІЛЬЦЕВОЮ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОЮ БАТАРЕЄЮ

Наведено результати досліджень термоелектричного джерела струму (ДС) одноразової дії з кільцевою термоелектричною батареєю. Результати досліджень підтвердили працездатність макетних зразків ДС з кільцевою термобатареєю (ТЕБ) і відповідність їх електричних параметрів вимогам технічного завдання за договором 3/2019. Бібл. 2, рис. 6, табл. 1.

Ключові слова: термоелектрична батарея, джерело струму, номінальна напруга, вихідна потужність.

Вступ

Відповідно до технічного завдання(ТЗ) за договором 3/2019 від 16.04.2019 р. було необхідно виготовити і дослідити термоелектричне джерело струму (ДС) з кільцевою термобатареєю. Термоелектричний перетворювач для ДС конструктивно мав бути виготовлений у вигляді тороїдного кільця із зовнішнім і внутрішнім діаметрами 50 і 39 мм, відповідно, і шириною 16.5 мм При цьому ДС повинен забезпечити вихідну потужність не менше 20 Вт при нарузі 5 В. Робочий перепад температури ΔT при цьому не повинен перевищувати 300 К.

Дослідження елементарних термобатарей для кільцевої ТЕБ

На кожному етапі виготовлення складової частини кільцевої термобатарей здійснювався післяопераційний візуальний контроль гілок термоелементів для ДС – елементарних однорядних ТЕБ з відбракуванням дефектних елементів по геометричних розмірах, також проводилось розбракування за опором гілок термоелементів.

Кожна ТЕБ, складена з гілок, які пройшли післяопераційний контроль (рис. 1), і яка, в свою чергу, є складовою частиною кільцевої ТЕБ для ДС, проходила випробування і

відбиралася після виміру її основних параметрів на спеціально створеній в Інституті термоелектрики установці "Алтек-10002", зовнішній вигляд якої показаний на рис. 2.

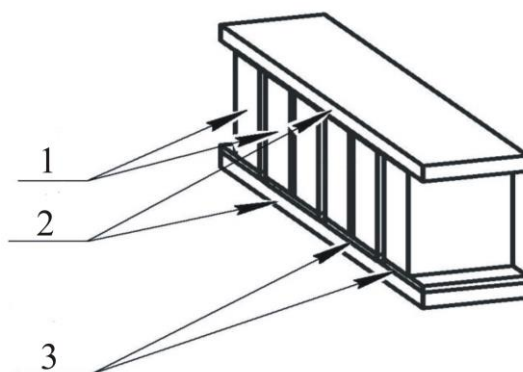


Рис. 1. Зовнішній вигляд елементарних ТЕБ.
1 – гілки термоелемента n - i p - типів провідності,
2 - керамічні пластини, 3 – мідні комутаційні пластини.

Цю установку призначено для визначення електричних і теплових параметрів термоелектричних модулів, які працюють в генераторному режимі.



Рис. 2. Установа «Алтек-10002».

Принцип дії установки при її використанні для виміру ТЕБ полягає в прямому вимірі термоЕРС або напруги на заданому навантаженні ТЕБ. ТЕБ розміщується між теплообмінниками, які створюють регульований стаціонарний тепловий потік. Установка також дозволяє виконувати виміри струму в колі навантаження ТЕБ, теплового потоку, який протікає через ТЕБ і визначення її потужності і ККД на встановленому навантаженні.

У ході лабораторних досліджень на вимірвальній установці відтворювалися теплові умови, аналогічні заданим в ТЗ. Метою таких досліджень було точне завдання робочого перепаду температур ΔT на ТЕБ, призначених для складання макетних зразків кільцевої ТЕБ і визначення їх початкових характеристик.

Під елементарною ТЕБ розміщується тепломір – пристрій для вимірювання теплового потоку, який створюється перепадом температур між робочими поверхнями ТЕБ. Тепломір є сукупністю мідних стержнів однакової довжини і площі поперечного перерізу, у бічних поверхнях яких на однаковій відстані від торців вмонтовано диференціальні термомпари. Для збільшення

чутливості тепломіра ці термопари сполучені між собою послідовно. Тепловий потік, який проходить уздовж стержнів, створює в місцях розміщення термопар задану різницю температур ΔT , яка пропорційна до величини теплового потоку. Коефіцієнт пропорційності для кожного розміру тепломіра розрахований і залежить від геометричних розмірів і констант матеріалів, з яких він виготовлений. Торці стержнів з двох сторін впаяно у тепловирівнюючі мідні пластини, які є основами тепломіра. На верхній основі тепломіра вбудовано спай вимірювальної диференціальної термопари. ЕРС цієї термопари відображає температуру холодної сторони ТЕБ. Те, що тепломір знаходиться з холодної сторони ТЕБ, дозволяє значно збільшити точність виміру теплового потоку, оскільки теплові втрати з тепломіра при цьому мінімальні.

Гарячий теплообмінник і тепломір змінні і вибираються відповідно до розмірів ТЕБ, які вимірюються.

Для ефективнішого теплообміну між теплообмінниками і ТЕБ зусилля притиску між ними має бути оптимізованим і контрольованим. Це досягається за допомогою важільно-гирьового пристрою, робота якого зрозуміла з схеми стенду. Зусилля притиску має бути обмежене міцністю застосованих в створенні ТЕБ матеріалів (для Bi_2Te_3 – найменш міцного матеріалу з якого зроблені гілки модуля, зусилля має бути не більше 20 кГ/см^2).

В процесі вимірів для визначення величини струму ТЕБ треба навантажувати зовнішнім опором. Для цього в установці використовується реостат з лінійними провідниками високого питомого опору. Така форма реостату вибрана для зручності точного підбору опору навантаження. При вимірі теплових величин похибки в основному визначаються втратами на теплопереходах між термопарами і тими об'єктами, куди вони вмонтовані. Якість теплового контакту також залежить від чистоти обробки поверхонь ТЕБ. Має місце також і неконтрольована втрата тепла з бічної поверхні тепломіра за рахунок підвищеного конвективного теплообміну і випромінювання тепла з поверхні тепломіра в довкілля, якщо температура холодної сторони модуля значно відрізняється від кімнатної.

На установці "Алтек-10002" було досліджено і відібрано по 36 шт. зразків ТЕБ (з висотою 5.5 мм і завдовжки 16.5 мм) для складання кільцевих ТЕБ для макетних зразків ДС. Характерні параметри і характеристики ТЕБ для кільцевої батареї наведено в таблиці.

Таблиця

Параметри елементарних ТЕБ

№ модуля	R, Ом	ΔT , °C	U, В	W, Вт	η , %
1	2	3	4	5	6
1	0.026	270	0.123	0.351	3.78
2	0.025	270	0.130	0.384	3.77
3	0.023	270	0.109	0.327	3.25
4	0.025	270	0.130	0.384	3.93
5	0.025	270	0.118	0.313	3.62
6	0.025	270	0.130	0.357	3.54
7	0.025	270	0.132	0.403	3.94
8	0.024	270	0.132	0.409	3.82
9	0.026	270	0.120	0.306	3.28
10	0.025	270	0.129	0.348	3.49

Продовження таблиці

11	0.024	270	0.128	0.365	3.31
12	0.025	270	0.123	0.326	3.55
13	0.026	270	0.120	0.282	3.39
14	0.024	270	0.125	0.331	3.43
15	0.026	270	0.131	0.347	3.65
16	0.025	270	0.134	0.395	3.81
17	0.025	270	0.127	0.381	3.78
18	0.025	270	0.126	0.359	3.75
19	0.026	270	0.131	0.367	3.69
20	0.025	270	0.122	0.329	3.51
21	0.025	270	0.132	0.383	3.77
22	0.025	270	0.133	0.392	3.72
23	0.025	270	0.128	0.333	3.35
24	0.025	270	0.135	0.398	3.86
25	0.024	270	0.127	0.349	3.59
26	0.028	270	0.110	0.242	2.90
27	0.026	270	0.119	0.292	3.01
28	0.027	270	0.121	0.296	3.39
29	0.024	270	0.107	0.256	3.13
30	0.026	270	0.128	0.346	3.60
31	0.028	270	0.132	0.343	3.61
32	0.027	270	0.128	0.339	3.56
33	0.026	270	0.128	0.358	3.59
34	0.026	270	0.118	0.301	3.43
35	0.025	270	0.123	0.338	3.50
36	0.025	270	0.121	0.296	3.25

де R – опір ТЕБ, ΔT – робочий перепад температури на ТЕБ, U - напруга, генерована ТЕБ, W – потужність ТЕБ, η – ККД ТЕБ. З однорядних ТЕБ було виготовлено кільцеві ТЭБ, зовнішній вигляд яких показано на рис. 3.

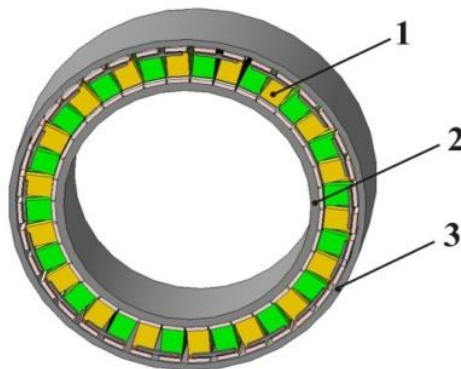


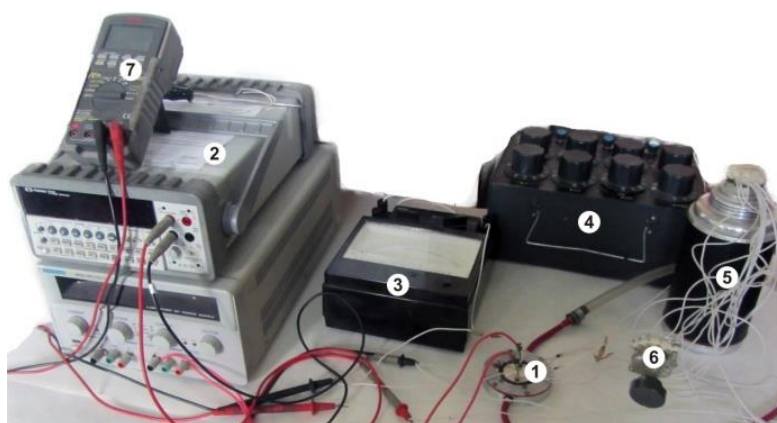
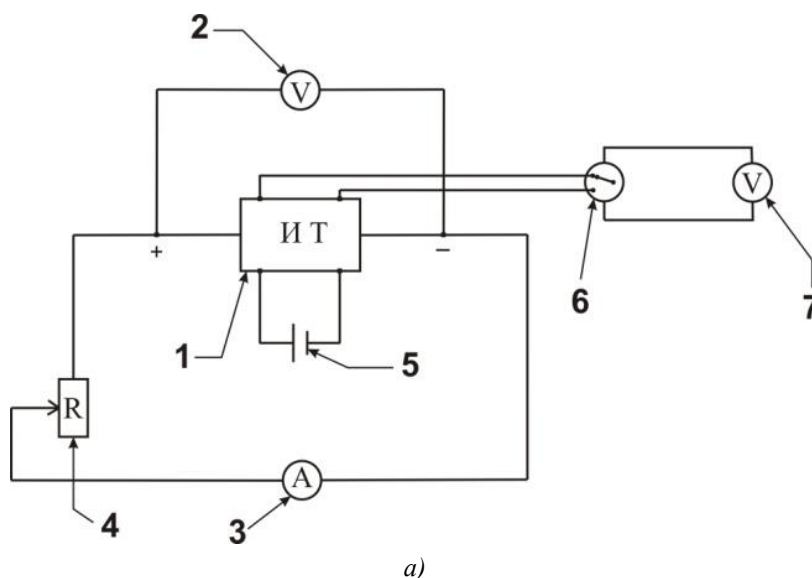
Рис. 3 – Схематичне зображення кільцевої ТЕБ : 1 – кільцева термоелектрична батарея; 2 - кільце гарячого теплообмінника; 3 – кільце холодного теплообмінника

Приведені в таблиці дані підтверджують працездатність ТЕБ відібраних для кільцевої ТЕБ, а також можливість забезпечення при їх використанні вихідних характеристик макетних зразків ДС на рівні, необхідному у відповідності з ТЗ за договором 3/2019.

Дослідження макетних зразків ІТ

Дослідження макетних зразків ДС проводилися у відповідності з розробленою програмою та методикою попередніх випробувань [2]. Як джерело тепла використовувався резистивний імітатор теплового навантаження. В ході досліджень електричних параметрів макетних зразків ДС на відповідність вимогам ТЗ визначалися залежності вихідних електричних параметрів (потужності P і напруги U) від перепаду температури ΔT .

Дослідження макетних зразків ДС здійснювалися на експериментальному стенді, схему і зовнішній вигляд якого наведено на рис. 4.



б)

Рис. 4. Схема (а) і зовнішній вигляд(б) експериментального стенду для дослідження макетних зразків ДС :

1 – макетний зразок ДС; 2 - мультиметр; 3 - амперметр;
4 – магазин опорів; 5 - блок живлення; 6 - перемикач термопар;
7 - цифровий вольтметр; 8 – посудина Дьюара з льодом.

Згідно ТЗ вихідна електрична потужність P і електрична напруга U макетного зразка ДС повинні складати 2 Вт і 5 В. З урахуванням наведених в ТЗ електричних параметрів, випробування макетного зразка ДС проводилися за значення зовнішнього опору $R = 12.5$ Ом, яке задавалося магазином опорів 4. Потужність імітатора теплового навантаження збільшувалася блоком живлення 5. За допомогою перемикача 6 і вольтметра 7, хромель-копелевими термопарами вимірювалися температури T_h , T_c теплообмінників ДС з подальшим визначенням робочого перепаду температури ΔT на кільцевій термобатарей. При цьому спай однієї термопари розташовувався безпосередньо на гарячому теплообміннику, а іншої термопари – на холодному теплообміннику. Інший спай термопари вміщувався в посудину Дьюара з льодом 8. Мультиметром 2 і амперметром 3 вимірювалися вихідна електрична напруга і сила струму макетного зразка ІТ.

Результати експериментальних досліджень макетного зразка ДС і залежності його електричних параметрів від перепаду температури ΔT наведено на рис. 5.

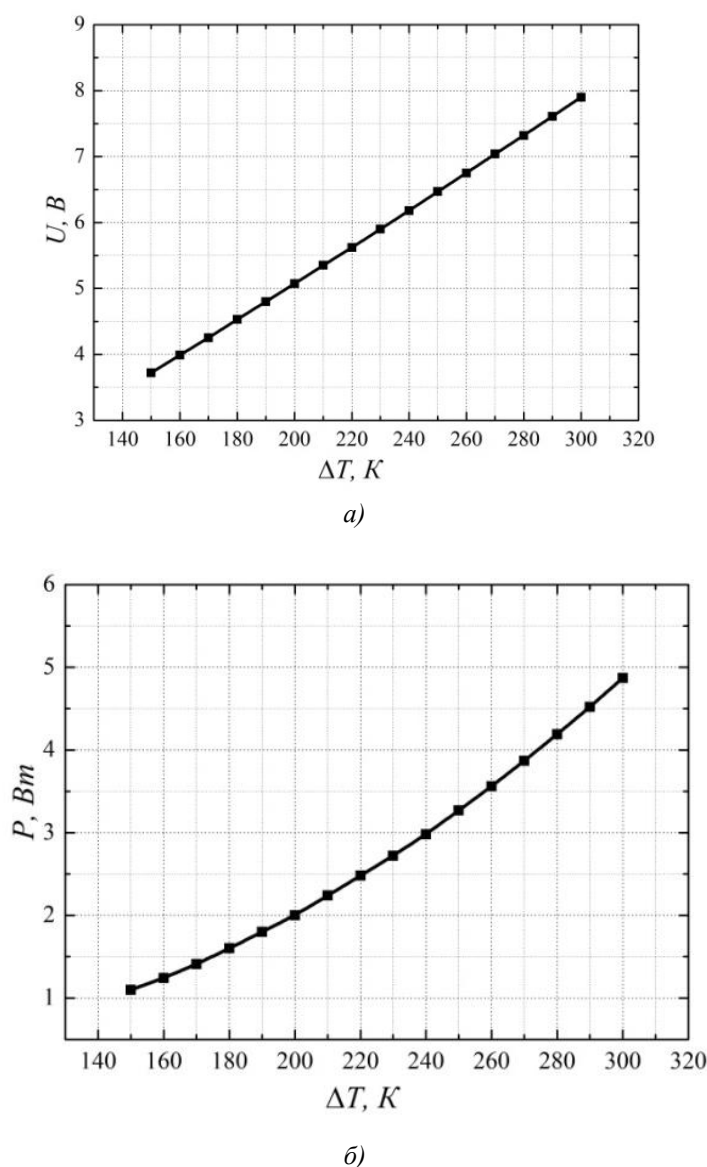


Рис. 5. Залежність електричної напруги U (а) і потужності P (б) макетного зразка ДС від робочого градієнта температури ΔT .

З рис. 5 видно, що зі збільшенням градієнта температури ΔT на термобатарей спостерігається зростання електричної напруги U і потужності P макетних зразків. Зокрема, для ДС необхідні у відповідності з ТЗ вихідні параметри досягаються вже за робочому перепаду температур 200 К. При цьому електрична потужність і напруга макетного зразка складають 2 Вт і 5 В. Зі збільшенням ΔT вихідні характеристики ДС покращуються, перевищуючи необхідні у відповідності з ТЗ значення.

Проте, слід враховувати, що у процесі вищеописаних досліджень ДС використовувався імітатор теплового навантаження, який забезпечує практично квазістаціонарний режим роботи ДС. Такий режим не забезпечуватиметься при використанні піротехнічного елемента (ПЕ). При використанні ПЕ матимуть місце більш жорсткі режими роботи ДС, для забезпечення яких знадобиться більша кількість тепла. Передбачувана залежність теплової потужності джерела тепла (ПЕ) від часу приведена на рис. 6.

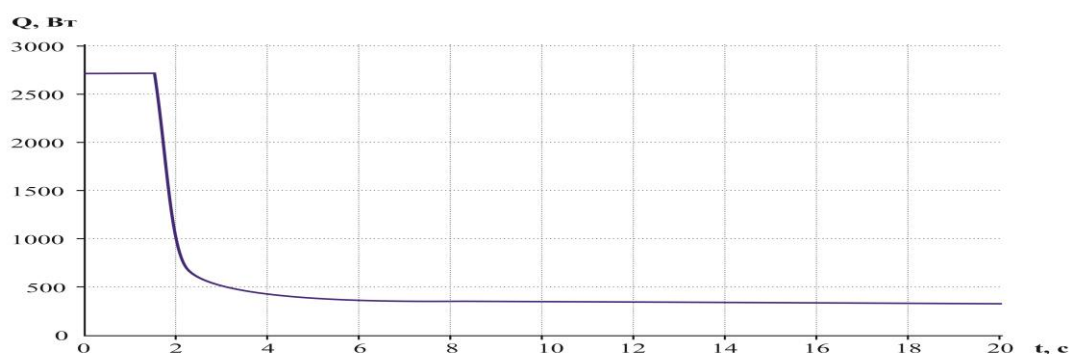


Рис. 6. Залежність теплової потужності ПЕ – джерела тепла від часу.

Висновки

Результати досліджень підтвердили працездатність макетних зразків ІТ і відповідність їх електричних параметрів вимогам ТЗ, викладеним в додатку 1 до договору 3/2019.

Література

1. Анатичук Л.І., Микитюк П.Д. «Проектування кільцевої термобатарей для джерела струму одноразової дії» // Термоелектрика – 2019, №3.
2. Програма і методика дослідження термоелектричного джерела струму з кільцевою термобатарейою. Договір 3/2019 від 16.04.2019 р. Інститут термоелектрики.

Надійшла до редакції 15.05.2019

Анатичук Л.І., акад. НАН України^{1,2}
Микитюк П.Д., канд. физ.-мат. наук^{1,2}
Микитюк О.Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент³

¹Інститут термоелектричності НАН і МОН України,
ул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна, e-mail: anatyck@gmail.com;

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

³Вищеє державне навчальне заклад України
«Буковинський державний медичний університет»,
Театральна площа, 2, Чернівці, 58002, Україна

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ИСТОЧНИКА ТОКА С КОЛЬЦЕВОЙ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ БАТАРЕЕЙ

Приведены результаты исследований термоэлектрического источника тока (ИТ) однократного действия с кольцевой термоэлектрической батареей. Результаты исследований подтвердили работоспособность макетных образцов ИТ с кольцевой термоэлектрической батареей (ТЭБ) и соответствие их электрических параметров требованиям технического задания по договору 3/2019. Библ. 2, рис. 6, табл. 1.

Ключевые слова: термоэлектрическая батарея, источник тока, напряжение, выходная мощность.

L.I. Anatyckuk acad. National Academy of Sciences of Ukraine^{1,2}

P.D. Mykytiuk. Cand.Sc. (Physics and Mathematics)^{1,2}

O.Yu. Mykytiuk. Cand.Sc. (Physics and Mathematics),
Assistant Professor³

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1, Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine;

²Yu.Fedkovych Chernivtsi National University,
2, Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

EXPERIMENTAL STUDIES OF A THERMOELECTRIC CURRENT SOURCE WITH AN ANNULAR THERMOPILE

The results of studies of a single-acting thermoelectric current source with an annular thermopile are presented. The research results confirmed the efficiency of current source breadboard models with an annular thermopile and the compliance of their electrical parameters with the requirements of the Performance Specification under Contract 3/2019. Bibl. 2, Fig. 6, Tabl. 1.

Key words: thermoelectric battery, current source, voltage, output power.

References

1. Anatyckuk L.I., Mykytiuk P.D. (2019). Design of an annular thermopile for a single acting current source. *J. Thermoelectricity*, №3
2. Program and methods of research on a thermoelectric current source with an annular thermopile. *Contract 3/2019 of 16.04.2019*. Institute of Thermoelectricity.

Submitted 15.05.2019

УДК 536.24



Прибила А.В.

Прибила А.В., канд. физ.-мат. наук^{1,2}

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

²Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, 58000, Україна

ПРОЕКТУВАННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО МОДУЛЯ ОХОЛОДЖЕННЯ ДЕТЕКТОРА РЕНТГЕНІВСЬКОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

У роботі наведено результати проектування термоелектричного багатокаскадного термоелектричного модуля охолодження рентгенівських детекторів. Розроблено конструкцію термоелектричного охолоджувача у складі детектора рентгенівського випромінювання та проаналізовано можливості його практичного використання. Бібл. 12, рис. 2.

Ключові слова: комп'ютерне проектування, термоелектричне охолодження, рентгенівський детектор.

Вступ

Загальна характеристика проблеми. Рентгенівські методи широко використовуються для неруйнівних мікроаналітичних досліджень структури і складу матеріалів з високою просторовою роздільною здатністю [1]. Сучасний стан методів ядерного мікроаналізу з використанням сфокусованих пучків іонів МеВ-них енергій з високою моноенергетичністю ($\Delta E/E = 10^{-5}$) дозволяє досягнути просторової роздільної здатності по поверхні до 100 нанометрів і до 10 нанометрів по товщині зразків. Подальше підвищення роздільної здатності суттєво залежить від покращення аналітичних характеристик напівпровідникових детекторів, а також від застосування широко-апертурних позиційно чутливих детекторів випромінювання нових типів [2].

Для підвищення роздільної здатності рентгенівських детекторів важливо вирішити задачу забезпечення оптимальної температури їх роботи [3 – 9].

Вона вирішується шляхом використання напівпровідникових термоелектричних модулів охолодження (ТМО) [5 – 9], що дозволяють забезпечити необхідну глибину охолодження в мінімальному робочому об'ємі детектора. Так однокаскадні термоелектричні модулі застосовуються для неглибокого охолодження (до 250 К), для охолодження сенсорів до робочої температури 230 К використовуються двокаскадні ТЕО, до температури 210 К – трикаскадні, до температури нижче 190 К – чотири і п'ятикаскадні ТМО [10].

Тому метою роботи є аналіз можливостей термоелектрики для охолодження рентгенівських детекторів та розробка конструкції багатокаскадного термоелектричного охолоджувача рентгенівських детекторів.

Фізична модель

Для розрахунків використано фізичну модель термоелектричного охолоджувача у складі детектора рентгенівського випромінювання представлену на рис. 1. Вона складається із корпусу 2 з берилієвим вікном 1, через яке випромінювання потрапляє на рентгенівський детектор 3. Необхідні температурні і теплові умови на поверхні детектора рентгенівського випромінювання забезпечуються багатокаскадним термоелектричним охолоджувачем електричною потужністю W , що складається із віток термоелектричного матеріалу n - і p -типу провідності 8, електропровідних комутуючих пластин 9, керамічних електроізоляційних пластин 10 та електричних виводів 7. Для зменшення теплових втрат всередині корпусу детектора 4 створюється вакуум. Відвід теплового потоку від термоелектричного охолоджувача здійснюється через основу корпусу детектора 5 та його кріплення 6.

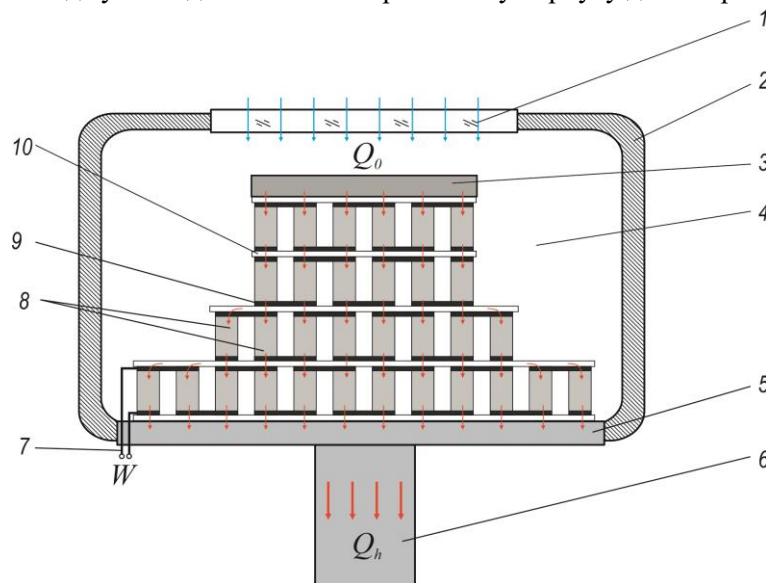


Рис. 1. Фізична модель термоелектричного багатокаскадного охолоджувача у складі детектора рентгенівського випромінювання: 1 – берилієве вікно; 2 – корпус приладу; 3 – детектор рентгенівського випромінювання; 4 – внутрішній простір приладу в якому створюється вакуум; 5 – основа корпусу приладу; 6 – кріплення приладу; 7 – електричні виводи; 8 – вітки термоелектричного матеріалу n - і p -типу провідності, 9 – електричні комутаційні пластини, 10 – керамічні електроізоляційні пластини.

Математичний і комп'ютерний описи моделі

Система рівнянь для опису холодильного коефіцієнту термоелектричного охолоджувача в залежності від параметрів елементів фізичної моделі визначається із рівнянь теплового балансу:

$$Q_c = \chi_1(T_c^{(1)} - T_c), \quad (1)$$

$$\begin{cases} Q_h = \chi_3(T_h^{(2)} - T_h^{(1)}) \\ Q_h = \chi_4(T_h^{(1)} - T_h) \end{cases}, \quad (2)$$

$$Q_h = Q_c + W_{TE}. \quad (3)$$

Тут $T_c^{(1)}$ – температура поверхні детектора, T_c – температура холодної сторони

термоелектричного модуля, χ_1 – тепловий контактний опір, $T_h^{(2)}$ – температура гарячої сторони термоелектричного модуля, $T_h^{(1)}$ – температура основи корпусу детектора, T_h – температура поверхні на яку відбувається відведення тепла, χ_2 – тепловий контактний опір, χ_3 – тепловий опір теплообмінника з «гарячого боку» термоелектричного перетворювача, Q_0 – холодопродуктивність, Q_h – теплопродуктивність.

Із врахуванням (1)–(3), вираз для холодильного коефіцієнта термоелектричного термоелектричного охолоджувача запишеться у вигляді:

$$\varepsilon_r = \frac{Q_0}{W + W_1} = \frac{\alpha I(T_c + Q_0 N_1) - 0.5 I^2 R - \lambda(T_h - T_c - (Q_h N_2 + Q_0 N_1))}{W + W_1}, \quad (4)$$

де α – диференціальний коефіцієнт Зеєбека матеріалу, I – сила струму, R – електричний опір термоелектричного модуля, λ – середній питомий коефіцієнт теплопровідності віток термоелектричного модуля, W_1 – потужність, що витрачається на забезпечення теплообміну,

$$N_1 = \frac{(\chi_1 + \chi_2)}{\chi_1 \chi_2}, \quad N_2 = \frac{(\chi_3 + \chi_4)}{\chi_3 \chi_4}. \quad (5)$$

Для проектування конструкції термоелектричного охолоджувача використано пакет прикладних програм COMSOL Multiphysics [11]. Для цього рівняння фізичної моделі необхідно представити у певному вигляді, як буде показано нижче.

Для опису потоків тепла й електрики скористаємося законами збереження енергії

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0 \quad (6)$$

та електричного заряду

$$\operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (7)$$

де

$$\vec{E} = \vec{q} + U \vec{j}, \quad (8)$$

$$\vec{q} = \kappa \nabla T + \alpha T \vec{j}, \quad (9)$$

$$\vec{j} = -\sigma \nabla U - \sigma \alpha \nabla T. \quad (10)$$

Тут \vec{E} – густина потоку енергії, \vec{q} – густина теплового потоку, \vec{j} – густина електричного струму, U – електричний потенціал, T – температура, α , σ , κ – коефіцієнти термоЕРС, електропровідності і теплопровідності.

Враховуючи (8)–(10), можна одержати

$$\vec{E} = -(\kappa + \alpha^2 \sigma T + \alpha U \sigma) \nabla T - (\alpha \sigma T + U \sigma) \nabla U. \quad (11)$$

Тоді закони збереження (5), (6) набувають вигляду:

$$-\nabla \left[(\kappa + \alpha^2 \sigma T + \alpha U \sigma) \nabla T \right] - \nabla \left[(\alpha \sigma T + U \sigma) \nabla U \right] = 0, \quad (12)$$

$$-\nabla(\sigma\alpha\nabla T) - \nabla(\sigma\nabla U) = 0. \quad (13)$$

Нелінійні диференціальні рівняння другого порядку в частинних похідних (12) і (13) визначають розподіл температури T та потенціалу U у термоелектричному охолоджувачі

Розв'язок цих рівнянь із використанням технології об'єктно-орієнтовано комп'ютерного моделювання [11] та теорії оптимального керування [12] дозволяє знайти оптимальну конструкцію термоелектричного перетворювача та залежності його характеристик.

Результати комп'ютерного проектування

В результаті комп'ютерного моделювання розраховано конструкцію термоелектричного багатокаскадного модуля (рис. 2), що забезпечує можливість його використання для забезпечення температурних умов детектора рентгенівського випромінювання.

Таким чином, термоелектричний охолоджувач містить 4 каскади – по 6, 12, 27 і 65 пар віток термоелектричного матеріалу, його габаритні розміри – 12 x 16 x 12 мм при забезпеченні площі охолоджуваної площадки 4 x 8 мм. Розміри віток термоелектричного матеріалу на основі телуриду вісмуту (Bi_2Te_3) n - і p - типів провідності – 0.6 x 0.6 x 1.8 мм. Електроізоляційні пластини з оксиду алюмінію (Al_2O_3) товщиною 0.5 мм, електрична комутація з міді (Cu) із антидифузійним прошарком нікелю (Ni) товщиною 0.1 мм.

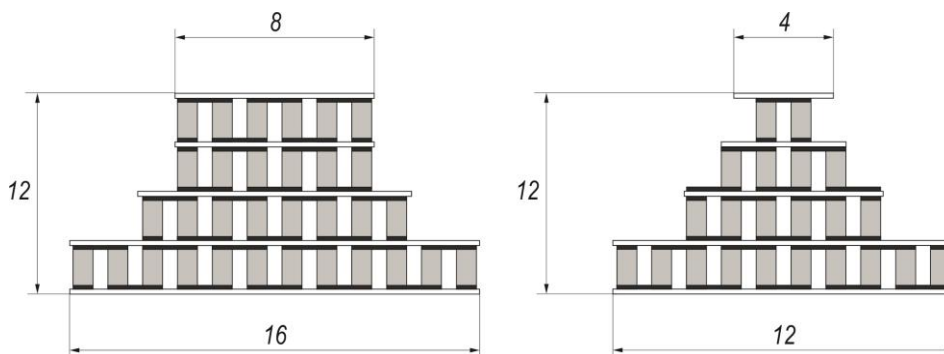


Рис. 2. Схематичне зображення конструкції термоелектричного охолоджувача для детектора рентгенівського випромінювання.

Розрахункова холодопродуктивність термоелектричного перетворювача складає $Q_0 = 57$ мВт (3 мВт – теплове навантаження від детектора плюс 54 мВт – натікання через випромінювання). При забезпеченні температури на детекторі $T_c^{(1)} = -70$ °С та за температури тепловідводу $T_h = +20$ °С холодильний коефіцієнт термоелектричного охолоджувача становить $\varepsilon = 0.02$. Отже, електрична потужність, що буде споживатися таким перетворювачем становить $W = 2.85$ Вт.

Отримані результати підтверджують можливості використання термоелектричних охолоджувачів для забезпечення температурних і теплових умов детекторів рентгенівського випромінювання і за своїми характеристиками переважають відомі світові аналоги [10].

Висновки

1. Проведено комп'ютерне проектування термоелектричного охолоджувача для рентгенівських детекторів.
2. Розраховано конструкцію та характеристики термоелектричного охолоджувача у складі детектора рентгенівського випромінювання. Таким чином, термоелектричний охолоджувач містить 4 каскади з термоелектричного матеріалу на основі Bi_2Te_3 габаритними розмірами – 12 x 16 x 12 мм при

забезпеченні площі охолоджуваної площадки 4 x 8 мм.

3. Визначено електричну потужність термоелектричного перетворювача $W = 2.85$ Вт, що при холодильному коефіцієнті $\varepsilon = 0.02$ забезпечує температуру основи детектора $T_c^{(1)} = -70$ °С та $\Delta T = 90$ К.

Література:

1. Buhay O.M., Drozdenko M.O., Storizhko V.Yu. Microanalytical X-ray facility in IAP NASU / O.M. Buhay, M.O. Drozdenko, V.Yu. Storizhko // Nanotechnology and nanomaterials, 27-30 August 2014: Book of Abstract. – Lviv, 2014. – P. 88-89.
2. Woldseth R. X-Ray Energy Spectrometry. Kevex: Scotts Valley, CA, 1973.
3. R.E. Stone, V.A. Barkley, and J.A Fleming, "Performance of a GammaRay and X-ray Spectrometer using Germanium and Si (Li) Detectors Cooled by a Closed-Cycle Cryogenic Mechanical Refrigerator," IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-33(1), 299 (1986).
4. E.C. Broerman, R.M. Keyser, T.R. Twomey, D.L. Upp. A new cooler for HPGe detector systems.– ORTEC, PerkinElmer Instruments, Inc Oak Ridge TN 37831-0895 USA.
5. Schlesinger TE, James RB. Semiconductors and Semimetals. Vol. 43. Semiconductors for Room Temperature Nuclear Detector Applications. Academic Press: New York, 1995.
6. Semiconductors for Room-temperature Detectors. Applications II, Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 487. Materials Research Society: Warrendale, PA, 1998.
7. Sokolov, A., Loupilov, A., & Gostilo, V. (2004). Semiconductor Peltier-cooled detectors for x-ray fluorescence analysis. X-Ray Spectrometry, 33(6), 462–465. doi:10.1002/xrs.744.
8. <http://www.rmtltd.ru/applications/photodetectors/xray.php>.
9. <http://www.amptek.com/wp-content/uploads/2014/04/XR-100T-CdTe-X-ray-and-Gamma-Ray-Detector-Specifications.pdf>.
10. Anatyshuk L.I., Vihor L.N., The limits of thermoelectric cooling for photodetectors. J. of Thermoelectricity, 2013, №5, p. 54-58.
11. COMSOL Multiphysics User's Guide // COMSOLAB. – 2010. – 804 p.
12. Анатышук Л.И., Семенюк В.А. Оптимальное управление свойствами термоэлектрических материалов и приборов. – Черновцы: Прут, 1992. – 263 p.

Надійшла до редакції 19.05.2019

Прибыла А.В., канд. физ.-мат. наук^{1,2}

¹Інститут термоелектричності НАН і МОН України, ул. Науки, 1,
Черновці, 58029, Україна, e-mail: anatysh@gmail.com;

²Черновицький національний університет імені Юрія Федьковича,
ул. Коцюбинського, 2, Черновці, 58012, Україна

В роботі приведені результати проектування термоелектричного многокаскадного термоелектричного модуля охолодження рентгеновських детекторів. Розроблена конструкція термоелектричного охладителя в складі детектора рентгеновського випромінювання і проаналізовані можливості його практичного використання. Бібл. 12, рис. 2.

Ключевые слова: комп'ютерне проектування, термоелектричне охолодження, рентгеновський детектор.

A.V. Prybyla^{1,2} *cand. phys. - math. sciences*

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

²Yu.Fedkovych Chernivtsi National University,
2, Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58000, Ukraine

DESIGN OF A THERMOELECTRIC COOLING MODULE FOR AN X-RAY DETECTOR

The paper presents the results of designing a thermoelectric multistage thermoelectric cooling module for X-ray detectors. The structure of a thermoelectric cooler as part of an X-ray detector is developed and the possibilities of its practical use are analyzed. Bibl. 12, Fig. 2.

Key words: computer design, thermoelectric cooling, X-ray detector.

References

1. Buhay O.M., Drozdenko M.O., Storizhko V.Yu. (2014). Microanalytical X-ray facility in IAP NASU. *Nanotechnology and Nanomaterials. Book of Abstracts*. Lviv.
2. Woldseth R. (1973). *X-Ray energy spectrometry*. Kevex: Scotts Valley, CA.
3. Stone R.E., Barkley V.A. and Fleming J.A. (1986). Performance of a Gamma-ray and X-ray spectrometer using Germanium and Si (Li) detectors cooled by a closed-cycle cryogenic mechanical refrigerator. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* NS-33, 1, 299.
4. Broerman E.C., Keyser R.M., Twomey T.R., Upp D.L. *A new cooler for HPGe detector systems, ORTEC*. PerkinElmer Instruments: Inc Oak Ridge TN 37831-0895 USA.
5. Schlesinger TE, James RB. (1995). *Semiconductors and semimetals. Vol. 43. Semiconductors for room temperature nuclear detector applications*. New York: Academic Press.
6. Semiconductors for room-temperature detectors. Applications II. (1998). *Materials Research Society Symposium Proceedings*, Vol. 487. Materials Research Society: Warrendale, PA.
7. Sokolov, A., Loupilov, A., Gostilo, V. (2004). Semiconductor Peltier-cooled detectors for x-ray fluorescence analysis. *X-Ray Spectrometry*, 33(6), 462–465. doi:10.1002/xrs.744.
8. <http://www.rmtld.ru/applications/photodetectors/xray.php>.
9. <http://www.amptek.com/wp-content/uploads/2014/04/XR-100T-CdTe-X-ray-and-Gamma-Ray-Detector-Specifications.pdf>.
10. Anatyck L.I., Vikhor L.N. (2013). The limits of thermoelectric cooling for photodetectors. *J. of Thermoelectricity*, 5, 54-58.
11. COMSOL Multiphysics User's Guide (2010). COMSOLAB, 804 p.
12. Anatyck L.I., Semeniuk V.A. (1992). *Optimalnoie upravleniie svoistvami termoelektricheskikh materialov i priborov [Optimal control over the properties of thermoelectric materials and instruments]*. Chernivtsi: Prut [in Russian].

Submitted 19.05.2019

ПРАВИЛА ОФОРМЛЕННЯ СТАТТІ

До опублікування у фаховому журналі приймаються наукові праці, які ніколи не друкувалися раніше. Стаття має бути написана на актуальну тему, містити результати глибокого наукового дослідження, новизну та обґрунтування наукових висновків відповідно до мети статті (поставленого завдання).

Матеріали, що публікуються в журналу, підлягають внутрішньому та зовнішньому рецензуванню, яке здійснюють члени редакційної колегії та міжнародної редакційної ради журналу або фахівці відповідної галузі. Рецензування проводиться конфіденційно, У разі негативної рецензії чи наявності суттєвих зауважень стаття може бути відхилена або повернута авторові (авторам) на доопрацювання. У випадку, коли автор (автори) не погоджується(ються) з думкою рецензента, за рішення редакційної колегії може бути проведене додаткове незалежне рецензування. Після внесення автором змін відповідно до зауважень рецензента статті підписується до друку.

Редакційна колегія має право на відмову у публікації рукописів, що містять опубліковані раніше дані, а також матеріалів, які не відповідають профілю журналу або матеріалів досліджень, що були проведені з порушенням етичних норм (наприклад, конфлікти між авторами чи між авторами і організацією, плагіат і т. ін.). Редакційна колегія журналу залишає за собою право редагувати та скорочувати рукописи без порушення авторського змісту. Відхилені рукописи авторам не повертаються.

Подання рукопису до журналу

Рукопис статті подається до редакції журналу в паперовому варіанті у двох примірниках та в електронному вигляді на електронному носії (диск, флешка). Електронний варіант статті повинен повністю відповідати паперовому варіанту. Рукопис має бути підписаний всіма співавторами або відповідальним представником.

В окремих випадках допускається замість електронного носія (диск, флешка) направляти статтю електронною поштою.

Рукописи подаються англійською мовою для англійськомовних авторів. Для російськомовних та україномовних авторів - англійською мовою і, відповідно, російською чи українською. Формат сторінок А4. Кількість сторінок – не більше 15 (разом з літературою та розширеними анотаціями). За узгодженням з редакцією число сторінок може бути збільшено.

До рукопису додається:

1. Офіційний лист-направлення, підписаний керівником установи, де виконувалась робота.
2. Ліцензійний договір про передачу авторського права (форму договору можна отримати в редакції журналу або завантажити з сайту журналу – [Договір.pdf](#)). Ліцензійний договір набуває чинності після прийняття статті до друку. Підписання ліцензійного договору автором(ами) означає, що вони ознайомлені і згодні з умовами договору.
3. Відомості про кожного з авторів – прізвище, ім'я, по-батькові повністю, посада, місце роботи, вчене звання, вчена ступінь, контактна інформація (телефон, адреса електронної пошти), код ORCID (за наявності). Відомості про авторів подаються:
авторами з України трьома мовами – українською, російською та англійською;
авторами з країн СНД двома мовами – російською та англійською;
авторами з далекого зарубіжжя – англійською мовою.
4. Носій інформації з текстом статті, рисунками, таблицями, відомостями про авторів в електронному вигляді.
5. Кольорова фотографія автора(ів). Чорно-білі фотографії редакція журналу не приймає. При

числі авторів більше двох їх фотографії не наводяться.

Вимоги до оформлення статті

Стаття має бути структурована за такими розділами:

- *Вступ*. Містить постановку проблеми, актуальність обраної теми, аналіз останніх досліджень і публікацій, мета і завдання.

- *Виклад основного матеріалу* дослідження і отриманих результатів.

- *Висновки*, де підведені підсумки роботи і перспективи подальших досліджень у цьому напрямі.

- *Список використаної літератури*.

Перша сторінка статті містить інформацію:

1. у верхньому лівому куті – індекс УДК (для авторів з України та країн СНД);
2. прізвище(а) та ініціали, вчена ступінь та вчене звання автора(ів);
3. назва установи, де працює автор(и); поштова адреса, номер телефону, адреса електронної пошти автора(ів);
4. назва статті;
5. анотація до статті – не більше 1 800 знаків. Анотація повинна відображати послідовну логіку опису результатів та описувати основні цілі дослідження, підсумовувати найбільш значимі результати;
6. ключові слова – не більше 8-ми слів.

Текст статті друкується шрифтом Times New Roman розміром 11 пт, міжрядковий інтервал 1.2 на папері формату А4, вирівнювання по ширині. У статті не повинно бути переносів слів.

Параметри сторінки: «дзеркальні поля» верхнє поле – 2.5 см, нижнє поле – 2.0 см, всередині – 2,0 см, ззовні – 3,0 см, від краю до колонтитула верхнього та нижнього – 1.27 см.

Графічні матеріали, фотографії подаються кольоровими, як виняток чорно – білими, у форматах .orj чи .cdr, допускається у форматах .jpg чи .tif. За бажанням автора таблиці і частина тексту також можуть бути кольоровими.

Рисунки друкуються на окремих сторінках. Текст на рисунках повинен бути виконаний шрифтом 10 пт. На графіках одиниці виміру вказуються через кому. Рисунки нумеруються в порядку їх розташування в тексті, частини рисунків нумеруються літерами – а, б, .. На звороті рисунка олівцем пишеться назва статті, автор(автори), номер рисунка. Скановані рисунки і графіки вставляти не допускається.

Таблиці подаються на окремих сторінках та повинні бути виконані з використанням табличного редактора MSWord. Використання символів псевдографіки для оформлення таблиць недопустиме.

Формули необхідно набирати у редакторах формул Equation або MatType. Статті з формулами, вписаними від руки, до друку не приймаються. Необхідно давати визначення (дефініцію) величин, які вперше вживаються у тексті, а далі користуватись відповідним терміном.

Підписи до рисунків і таблиць друкуються в рукописі після списку літератури.

Список використаних літературних джерел наводиться у кінці статті. Посилання на літературні джерела нумеруються послідовно в порядку їх цитування у тексті статті. Посилання на неопубліковані та незавершені роботи недопустимі.

Увага! У зв'язку із включенням журналу до міжнародних бібліографічно-реферативних баз даних, список літератури має складатися з двох блоків: ЛІТЕРАТУРА і REFERENCES (ця вимога діє і для англomовних статей):

ЛІТЕРАТУРА – джерела мовою оригіналу, оформлені відповідно до українського стандарту бібліографічного опису ДСТУ 8302:2015. За допомогою VAK.in.ua (<http://vak.in.ua>) Ви можете автоматично, швидко і легко оформити Ваш «Список використаних джерел» відповідно до вимог Державної атестаційної комісії (ДАК) України та оформити посилання на наукові джерела в Україні зрозуміло та уніфіковано. У цьому порталі полегшено процедури оформлення наукових джерел при написанні Ваших публікацій, дисертацій та інших наукових робіт.

REFERENCES – той же список літератури, транслітерований в романському алфавіті (рекомендації за міжнародним бібліографічним стандартом APA-2010, правила до оформлення транслітерованого списку літератури References на сайті <http://www.dse.org.ua>, розділ для авторів).

Для пришвидшення публікації статті просимо дотримуватись наступних правил:

- У верхньому лівому куті першої сторінки статті – індекс УДК;
- ініціали та прізвище авторів;
- науковий ступінь, учене звання;

з нового рядка шрифтом Times New Roman розміром 12 пт, міжрядковий інтервал 1.2 вирівнювання по центру;

- назва організації, адреса (вулиця, місто, індекс, країна), електронна адреса авторів;

з нового рядка на 1 см нижче ініціалів та прізвища авторів шрифтом Times New Roman розміром 11 пт, міжрядковий інтервал 1.2 вирівнювання по центру;

○ назва статті розміщується на 1 см нижче назви організації, заголовними буквами напівжирним шрифтом New Roman розмір 12 пт, міжрядковий інтервал 1.2 вирівнювання по центру. Назва статті має бути конкретною і по можливості короткою;

- анотація розміщується на 1 см нижче назви статті шрифтом Times New Roman розміром 10 пт, курсивом, міжрядковий інтервал 1.2 вирівнювання по ширині українською чи російською (для україномовних та російськомовних авторів відповідно) та англійською мовами;

- ключові слова розміщуються нижче анотації шрифтом Times New Roman розміром 10 пт, міжрядковий інтервал 1.2 вирівнювання по ширині. Мова ключових слів відповідає мові анотації. Заголовок «Ключові слова» - шрифт Times New Roman, розмір 10 пт, напівжирний;

- основний текст статті розміщується на 1 см нижче анотації з абзацу 1 см, шрифт Times New Roman, розмір 11 пт, міжрядковий інтервал 1,2 вирівнювання по ширині;

формули набирають у редакторі формул шрифтами: Symbol, Times New Roman. Розмір шрифтів: «звичайний» - 12 пт, «крупний індекс» - 7 пт, «дрібний індекс» - 5 пт, «крупний символ» - 18 пт, «дрібний символ» - 12 пт). Формула розміщується по тексту, вирівнюється по центру і не повинна займати більше 5/6 ширини рядка, нумерація формул у круглих дужках справа;

- розмірності всіх величин, що використовуються в статті, подаються в системі СІ, використовувани символи повинні бути пояснені;

• рисунки розміщуються по тексту. Рисунки та фотографії повинні бути чіткими і контрастними; осі графіків - паралельними до країв листка, усуваючи тим самим можливість появи зрушення кутів при масштабуванні; рисунки у журнал подаються кольоровими, чорно-білі - редакція журналу не приймає;

- таблиці розміщують по тексту. Ширина таблиці повинна бути на 1 см менша ширини рядка. Над таблицею вказують її порядковий номер, вирівнювання по правому краю. Нумерація таблиць

по всьому тексту статті наскрізна. Назва таблиці розміщується під її номером, вирівнювання по центру;

- список літератури наводять у кінці статті. Посилання на літературу вказують за текстом в квадратних дужках. Послідовність джерел у списку літератури має відповідати порядку їх згадування в тексті. Нижче наведені приклади різних типів посилань на літературу.

Приклади оформлення посилань на літературні джерела для ЛІТЕРАТУРИ

Статті в журналах

Анатичук Л.І., Михайловський В.Я., Максимук М.В., Андрусак І.С. Експериментальні дослідження термоелектричного автомобільного передпускового нагрівача на дизельному паливі. *Термоелектрика*. 2016. №4. С.84–94.

Книги

Анатичук Л.И. *Термоэлементы и термоэлектрические устройства. Справочник*. Киев, Наукова думка, 1979. 768 с.

Патенти

Патент України № 85293. Анатичук Л.І., Лусте О.Я., Ніцович О.В. Термоелемент

Матеріали конференцій

Лисько В.В. *Современное состояние и ожидаемый прогресс в метрологии термоэлектрических материалов*. Материали XVII Международного форума по термоэлектричеству (14-18 мая 2017, г. Белфаст), Черновцы, 2017. 64 с.

Автореферати дисертацій

Кобилянський Р.Р. *Термоелектричні прилади для лікування захворювань шкіри*.: автореф. дис. фіз.-мат. наук. Чернівці, 2011. 20 с.

Приклади оформлення посилань на літературні джерела для REFERENCES

Статті в журналах

Gorskiy P.V. (2015). Ob usloviakh vysokoi dobrotnosti i metodika poiska perpektivny sverhreshetochny termoelektricheskikh materialov [On the conditions of high figure of merit and methods of search for promising superlattice thermoelectric materials]. *Termoelektrichestvo - J.Thermoelectricity*, 3, 5 – 14 [in Russian].

Книги

Anatychuk L.I. (2003). *Thermoelectricity. Vol.2. Thermoelectric power converters*. Kyiv, Chernivtsi: Institute of Thermoelectricity.

Патенти

Patent of Ukraine № 85293. Anatychuk L. I., Luste O.Ya., Nitzovych O.V. Thermoelements [In Ukrainian].

Матеріали конференцій

Rifert V.G.. Intensification of heat exchange at condensation and evaporation of liquid in 5 flowing-down films. In: *Proc. of the 9th International Conference Heat Transfer*. May 20-25, 1990, Israel.

Автореферати дисертацій

Mashukov A.O. *Efficiency hospital state of rehabilitation of patients with color cancer*. Phd (Med.) Odesa, 2011 [In Ukrainian].