

герб

ВІСНИК ЧЕРКАСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ

Серія
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ
НАУКИ
№ 1. 2022

Фізика матеріалів
Математична та обчислювальна фізика
Методичні нотатки - з досвіду викладання
фізики та математики в вищій школі

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

ISSN 2076-5851
DOI: 10.31651/2076-5851-2022-1

ВІСНИК ЧЕРКАСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ

Серія
ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Виходить 1 раз на рік
Заснований у березні 1997 року

№ 1. 2022

Черкаси – 2022

ISSN: 2076-5851

**Засновник, редакція, видавець і виготовлювач –
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
Свідоцтво про державну реєстрацію КВ № 21394-11194Р від 25.06.2015 р.**

Наукові статті збірника рекомендовані фізикам, математикам - науковцям, викладачам вищої школи, аспірантам, студентам та пошукачам.

Журнал входить до переліку наукових фахових видань України з фізико-математичних наук (Наказ МОН України від 12 травня 2015 р. № 528).

Випуск № 1. 2022 наукового журналу Вісник Черкаського університету. Серія: фізико-математичні науки видається за рішенням Вченої ради Черкаського національного університету імені Богдана Хмельницького (протокол № 6 від 13.12.2022 року).

Журнал індексується в міжнародних наукових базах CiteFactor (impact factor 0,9), Google Scholar.

Редакційна колегія серії:

Ляшенко Ю.О., д.ф.-м.н., проф. (головний редактор); Сторожук Н.В., к.ф.-м.н., доц. (відповідальний секретар); Гусак А.М., д.ф.-м.н., проф.; Danielewski Marek, Professor (Poland); Chih Chen, Professor (Taiwan); Erdelyi Zoltan, Professor (Hungary); Filipek Robert, Professor (Poland); Hodaj Fiqiri, Professor (France); Kodentsov Alexandre, Dr. (Netherlands); Kozubski Rafal, Professor, DSc (Poland); Liashenko Oleksii, Dr. (Switzerland); Malyi Oleksandr, Dr. (USA); Герасименко В.І., д.ф.-м.н., проф.; Гохман О.Р., д.ф.-м.н., проф.; Запорожець Т.В., д.ф.-м.н., проф.; Зуєв О.Л., д.ф.-м.н., проф.; Головня Б.П., д.т.н., доц.; Мазанко В.Ф., д.т.н., проф.; Мінаєв Б.П., д.х.н., проф.; Слинько В.І., д.ф.-м.н.; Соловійов В.М., д.ф.-м.н., проф.; Стеблянко П.О., д.ф.-м.н., проф.; Шматко О.А., д.т.н., проф.; Щербак В.Ф., д.ф.-м.н., проф.; Буряченко К.О., к.ф.-м.н., доц.; Гладка Л.І., к.ф.-м.н., доц.; Корнієнко С.В., к.ф.-м.н., доц.; Пасічний М.О., к.ф.-м.н., доц.; Атамась В.В., к.ф.-м.н., доц.; Бабенко С.В., к.ф.-м.н.

За дотримання прав інтелектуальної власності, достовірність матеріалів та обґрунтування висновків відповідають автори.

Адреса редакційної колегії:
18000, Черкаси, бульвар Шевченка, 79,
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького,
кафедра фізики. Тел. (0472) 32-12-20
web-сайт: <http://phys-ejournal.cdu.edu.ua>
e-mail: phys_math_bulletin@ukr.net

© Черкаський національний
університет, 2022

**Founder, Editor, Publisher and Manufacturer -
Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy
Certificate of state registration KB № 21394-11194P dated 25.06.2015**

Scientific articles of the collection are recommended to physicists, mathematicians – scientists, high school lecturers, graduate students, students and researchers.

The journal is included in the list of scientific professional publications of Ukraine in physical and mathematical sciences (Order of the Ministry of Education and Science of Ukraine of May 12, 2015 № 528).

Issue № 1. 2022 of the scientific journal Bulletin of Cherkasy University. Series: Physical and Mathematical Sciences is published by the decision of the Academic Council of Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy (Minutes № 6 of 13.12.2022).

The journal is indexed in international scientific databases CiteFactor (impact factor 0.9), Google Scholar.

Editorial board of the series:

Liashenko Yu.O., D. of Ph.-M. Sc., prof. (Editor in Chief); Storozhuk N.V., Cand. of Ph.-M. Sc., Assoc. Prof. (Executive Secretary); Gusak A.M., D. of Ph.-M. Sc., Prof.; Danielewski Marek, Professor (Poland); Chih Chen, Professor (Taiwan); Erdelyi Zoltan, Professor (Hungary); Filipek Robert, Professor (Poland); Hodaj Fiqiri, Professor (France); Kodentsov Alexandre, Dr. (Netherlands); Kozubski Rafal, Professor, DSc (Poland); Liashenko Oleksii, Dr. (Switzerland); Malyi Oleksandr, Dr. (USA); Gerasimenko V.I., D. of Ph.-M. Sc., Prof.; Gokhman O.R., D. of Ph.-M. Sc., Prof.; Zaporozhets T.V., D. of Ph.-M. Sc., Prof.; Zuev O.L., D. of Ph.-M. Sc., Prof.; Golovnya B.P., D. of Tech. Sc., Assoc.; Mazanko V.F., D. of Tech. Sc., Prof.; Minaev B.P., D. of Ch. Sc., Prof.; Slynko V.I., D. of Ph.-M. Sc.; Solovyov V.M., D. of Ph.-M. Sc., prof.; Steblyanko P.O., D. of Ph.-M. Sc., prof.; Shmatko O.A., D. of Tech. Sc., Prof.; Shcherbak V.F., D. of Ph.-M. Sc., prof.; Buryachenko K.O., D. of Ph.-M. Sc., Assoc.; Gladka L.I., Cand. of Ph.-M. Sc., Assoc.; Kornienko S.V., Cand. of Ph.-M. Sc., Assoc.; Pasichny M.O., Cand. of Ph.-M. Sc., Assoc.; Atamas V.V., Cand. of Ph.-M. Sc., Assoc.; Babenko S.V., Cand. of Ph.-M. Sc.

The authors are responsible for the observance of intellectual property rights, authenticity of materials and substantiation of conclusions.

Editorial Board Address:

18000, Cherkasy, Shevchenko Boulevard, 79
Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy,
Department of Physics. Tel. (0472) 32-12-20
website: <http://phys-ejournal.cdu.edu.ua>
e-mail: phys_math_bulletin@ukr.net

ФІЗИКА МАТЕРІАЛІВ

ORCID: 0000-0001-8267-8365

Д. І. Коломієць

Аспірант кафедри фізики, ННІ ІНФОТЕХ,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси,
Україна,
denyskolomiiets95@gmail.com

ORCID: 0000-0002-8434-1544

М. О. Пасічний

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
завідувач кафедри фізики, Черкаський національний університет імені Богдана
Хмельницького, Черкаси, Україна,
pasichnyy@ukr.net

DOI: 10.31651/2076-5851-2022-3-14

PACS: 61.46.+w, 68.35.Rh, 81.10.-h

ХАРАКТЕРНІ ОСОБЛИВОСТІ ПРОЦЕСУ ГІДРОМЕХАНІЧНОГО СИНТЕЗУ НАНОПОЯСІВ ПЕНТАОКСИДУ ВАНАДІЮ

У роботі представлено результати експериментального дослідження процесу синтезу нанострічок пентаоксиду ванадію (V_2O_5) за умов гідромеханічного впливу без застосування високотемпературної обробки. Як вихідні компоненти використовувалися порошок V_2O_5 та водні розчини хлориду натрію (NaCl) різної концентрації. Синтез проводився шляхом тривалого перемішування суспензії зі постійною швидкістю обертання. У ході реакції реєструвались зміни рН, в'язкості та електропровідності, що дозволило ідентифікувати етапи перекристалізації.

Методами скануючої електронної мікроскопії продемонстровано формування одновимірних наноструктур стрічкоподібної морфології з довжиною до 7 мкм і товщиною близько 10–15 нм. Зміни поверхневої структури супроводжувалися поступовим зникненням вихідної зернистої морфології та утворенням нанопоясів. За допомогою рентгенівської дифрактометрії виявлено зменшення інтенсивності кристалічних піків із часом, що свідчить про перехід до нанокристалічного стану матеріалу. Піки зникали повністю після 96 годин гідромеханічної обробки.

Результати циклічної вольтамперометрії вказують на те, що композитні електроди на основі графіту з додаванням синтезованих нанострічок V_2O_5 мають найкращі електрохімічні характеристики серед усіх досліджуваних варіантів. Вольтамперограми демонструють чітко виражені редокс-піки та збільшену інтегральну площу, що свідчить про підвищену питому ємність. Представлені результати підтверджують ефективність гідромеханічного підходу до синтезу функціональних наноматеріалів з потенціалом для використання в літій-іонних акумуляторах.

Ключові слова: наноструктури, нанопояси, оксиди металів, пентаоксид ванадію, гідромеханічний метод, нерівноважні системи.

1. Вступ

Розвиток технологій зберігання та перетворення енергії значною мірою залежить від прогресу у створенні нових функціональних матеріалів з нанорозмірною структурою.

Зокрема, напівпровідникові оксиди металів активно вивчаються як основа для виготовлення електродів, сенсорів, фотокаталізаторів і джерел живлення нового покоління [1–4]. Особливий інтерес викликають наноструктуровані форми таких оксидів – зокрема, нанопояси, нанодропи, нанодиски – які, завдяки своїй морфології, забезпечують покращену іонну та електронну провідність, підвищену питому поверхню та механічну стабільність.

Серед оксидів перехідних металів найбільш перспективним матеріалом для катодів у літій-іонних акумуляторах є пентаоксид ванадію (V_2O_5), що поєднує високу теоретичну ємність, багатоступеневі окисно-відновні перетворення та доступність вихідної сировини [5]. Використання нанострічок V_2O_5 дає змогу зменшити дифузійний опір і покращити електроди. Проте масштабованість їх виробництва залишається однією з основних проблем практичного застосування.

Традиційні методи синтезу, зокрема твердофазні або гідротермальні, потребують високих температур і тисків, високотехнологічного обладнання або тривалого часу обробки [2, 4, 6]. Це ускладнює масштабування та контроль параметрів росту наноструктур. У цьому контексті альтернативою є гідромеханічні методи, що базуються на використанні інтенсивного перемішування в умовах відкритої системи. Такі підходи дозволяють впливати на кінетику кристалізації шляхом варіювання концентрації того чи іншого компонента в системі, швидкості обертання, водневого показника (pH), в'язкості середовища тощо [7, 9].

Окрему роль у поясненні механізмів росту наноструктур відіграють сучасні теоретичні моделі. У роботах [6–8] показано, що в умовах нерівноважного середовища реалізуються анізотропна нуклеація, балістичні стрибки атомів та ефекти антидозрівання, що сприяють утворенню видовжених структур без потреби у високій температурі. Ці підходи формують фізичну основу для розуміння поведінки наноструктур у динамічних рідинних середовищах.

Результати попередніх експериментальних досліджень авторів підтвердили ефективність поєднання механічного перемішування та хімічного каталізу з боку NaCl як чинників, що визначають морфологію синтезованих V_2O_5 нанопоясів [9, 10]. Зокрема, було виявлено залежність тривалості перекристалізації від концентрації солі та швидкості перемішування.

Метою цієї роботи є експериментальне дослідження процесу гідромеханічного синтезу нанопоясів пентаоксиду ванадію та аналіз впливу ключових параметрів (температура, концентрація реагентів, швидкість перемішування) на морфологію і електрохімічні властивості одержаних структур. Робота поєднує попередні результати з новими спостереженнями, зокрема скануючої електронної мікроскопії (SEM), рентгенівської дифрактометрії (XRD) та циклічної вольтамперометрії (CV), і розширює розуміння умов формування та утворення наноматеріалів.

2. Методика експерименту

Синтез нанопоясів пентаоксиду ванадію (V_2O_5) здійснювався в умовах водного середовища з використанням гідромеханічного методу. Як вихідний матеріал застосовувався комерційний порошок V_2O_5 , розміри частинок якого переважно знаходилися в межах 10–100 мкм. Реакційне середовище формувалося шляхом розчинення хлориду натрію (NaCl) у 150 мл дистильованої води до концентрацій у діапазоні 0,5 – 4 моль/л.

Після стабілізації температури у межах 25–30 °C до розчину додавали вихідний оксид ванадію, забезпечуючи постійне перемішування за допомогою магнітної мішалки із постійною швидкістю обертання (від 200 до 800 об/хв залежно від серії дослідів). Для руйнування первинних агломератів та підвищення однорідності суспензії

використовували ультразвукову обробку тривалістю 10 хвилин. Хід реакції контролювали шляхом вимірювання показників рН, в'язкості та електропровідності за допомогою комбінованого вимірювального пристрою. Процес синтезу тривав впродовж 24–96 годин.

Для приготування зразків до морфологічного та фазового аналізу суспензію промивали дистильованою водою з наступним центрифугуванням та фільтруванням. Осад висушували при температурі 40 °С на повітрі.

Для растрової електронної мікроскопії (SEM) приготування зразків здійснювалося шляхом нанесення суспензії на металеві відполіровані підкладки з вольфраму. Для запобігання кристалізації залишкової солі суспензію попередньо розбавляли у співвідношенні 1:50. Для дослідження фазового складу матеріалу застосовували рентгенівську дифрактометрію (XRD), зразки для якої формували шляхом нанесення речовини на скляну підкладку.

Оцінку електрохімічних характеристик проводили методом циклічної вольтамперометрії. Робочі електроди виготовляли шляхом пресування суміші порошку нанострічок V_2O_5 . Випробування електродів проводили у триелектродній комірці з використанням $Ag/AgCl$ як еталонного електрода

3. Результати та обговорення

Хід синтезу нанопоясів V_2O_5 аналізували за зміною фізико-хімічних властивостей суспензії, морфологічними та структурними спостереженнями, а також електрохімічними характеристиками одержаних матеріалів.

На Рис. 1–3 наведено часові залежності зміни рН, в'язкості та потужності, споживаної двигуном мішалки. Спостерігається кореляція між зменшенням кислотності та зростанням в'язкості середовища, що супроводжується зміною кольору суспензії від світло-коричневого до бордового. Ці зміни свідчать про перебіг перекристалізації вихідного порошку. Паралельне зростання потужності обертання (Рис. 3) вказує на збільшення опору руху, що може використовуватись як опосередкований індикатор завершення фази росту нанострічок.

На Рис. 4 продемонстровано вплив концентрації $NaCl$ на швидкість утворення наноструктур. Встановлено, що навіть незначне введення солі істотно пришвидшує реакцію, тоді як за її відсутності процес може тривати до 6–8 місяців. Концентрація $NaCl$ виявилася ключовим фактором, що запускає механізм перекристалізації.

Додатково було досліджено процес розчинення V_2O_5 у залежності від швидкості перемішування. На Рис. 5 показано зміну електропровідності, яка зростає пропорційно інтенсивності обертання, хоча частка вихідного порошку у суспензії залишається незмінною (~0,76 г/л), що свідчить про обмежену розчинність оксиду. Вимірювання електропровідності суспензії здійснювалося кондуктометром PC-800.

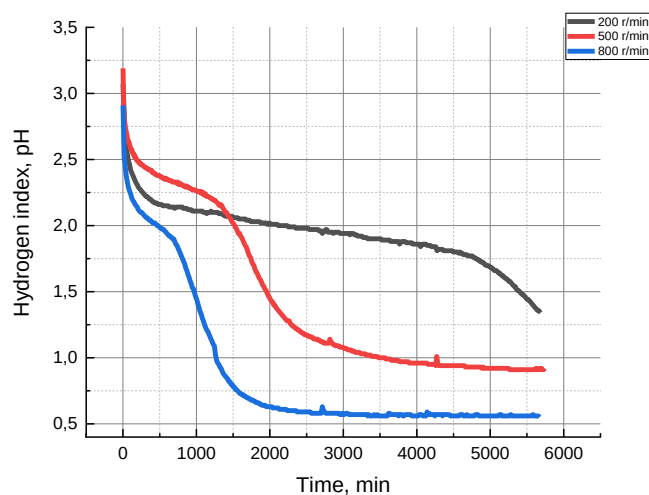


Рис.1. Зведений графік часової зміни водневого показника pH розчинів в залежності від швидкості перемішування. Пентоксид ванадію V_2O_5 (5 г.), швидкість перемішування (200 об/хв., 500 об/хв., 800 об/хв.), температура розчинів в процесі дослідження (25 °C), 2М розчин NaCl.

Fig. 1. A summary graph of the time change of the hydrogen pH indicator of the solutions depending on the speed of mixing. Vanadium pentoxide V_2O_5 (5 g), stirring speed (200 rpm, 500 rpm, 800 rpm), solution temperature during the study (25 °C), 2M NaCl solution.

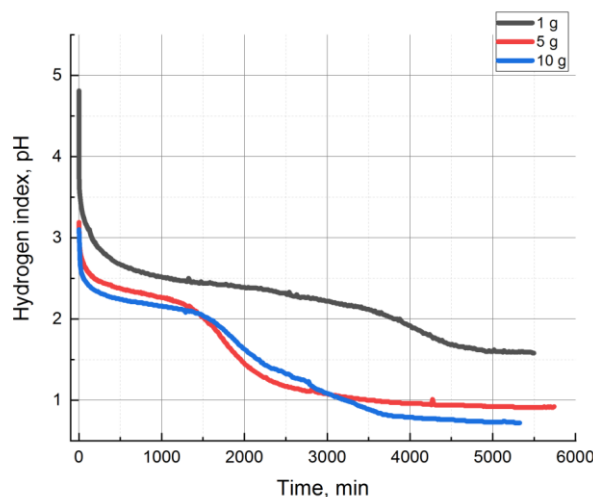


Рис.2. Зведений графік часової зміни водневого показника pH розчинів в залежності від концентрації в розчині V_2O_5 . Пентоксид ванадію V_2O_5 (1 г., 5 г., 10 г.), швидкість перемішування (500 об/хв.), температура розчинів в процесі дослідження (25 °C).

Fig. 2. Summary graph of the time change of the hydrogen indicator of pH solutions depending on the concentration in the V_2O_5 solution. Vanadium pentoxide V_2O_5 (1 g, 5 g, 10 g), stirring speed (500 rpm), solution temperature during the study (25 °C).

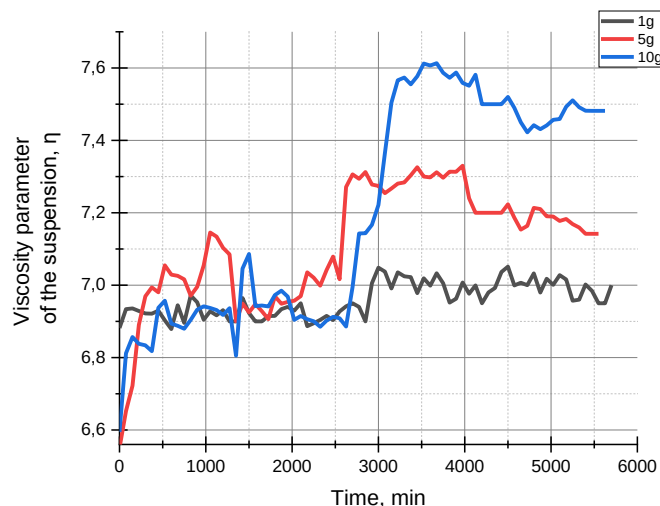


Рис.3. Зведений графік часової зміни вязкості розчинів в залежності від концентрації в розчині V₂O₅. Пентоксид ванадію V₂O₅ (1 г., 5 г., 10 г.), швидкість перемішування (500 об/хв.), температура розчинів в процесі дослідження (25 °C).

Fig. 3. A summary graph of the time change in the viscosity of solutions depending on the concentration in the V₂O₅ solution. Vanadium pentoxide V₂O₅ (1 g, 5 g, 10 g), stirring speed (500 rpm), solution temperature during the study (25 °C).

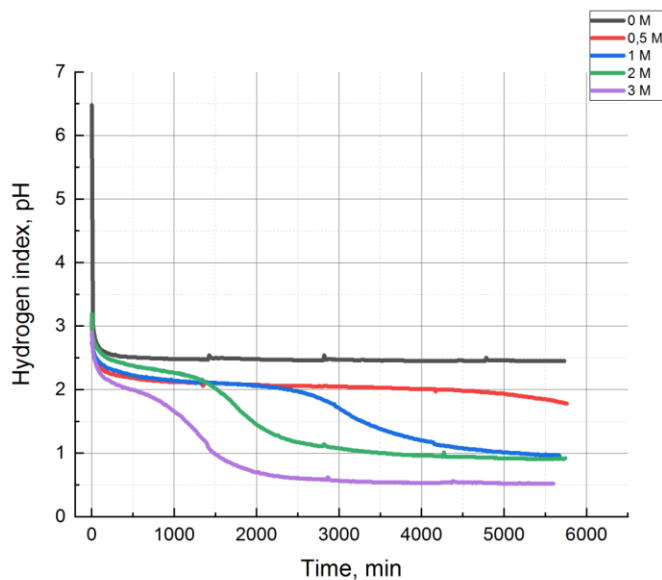


Рис.4. Зведений графік часової зміни водневого показника рН розчинів в залежності від концентрації в розчині NaCl. Пентоксид ванадію V₂O₅ (5 г.), швидкість перемішування (500 об/хв.), температура розчинів в процесі дослідження (25 °C), різні концентрації NaCl (0M, 0.5 M, 1 M, 2 M, 3 M).

Fig. 4. A summary graph of the time change of the hydrogen indicator of the pH of the solutions depending on the concentration in the NaCl solution. Vanadium pentoxide V₂O₅ (5 g), stirring speed (500 rpm), temperature of solutions during the study (25 °C), different concentration of NaCl (0M, 0.5 M, 1 M, 2 M, 3 M).

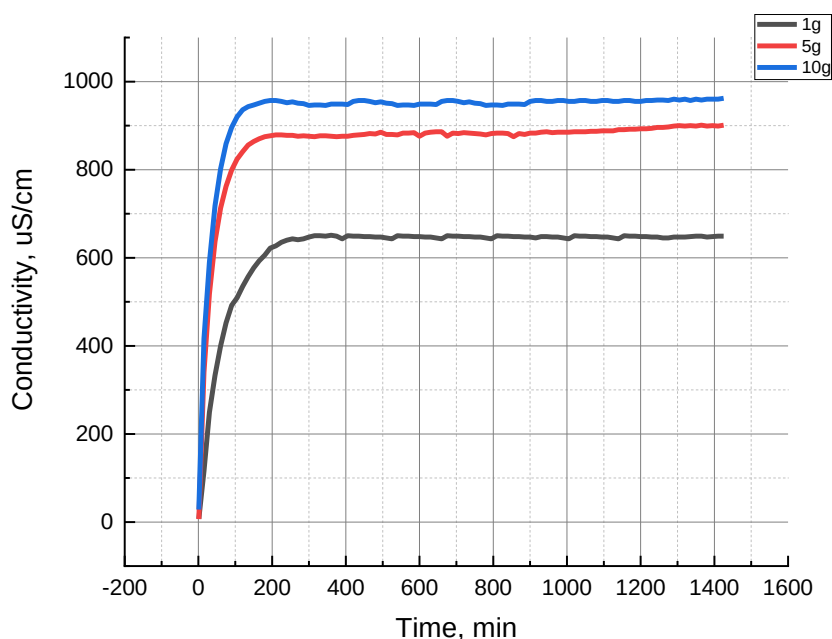


Рис.5. Часова зміна електропровідності розчину у процесі інтенсивного перемішування (500 об/хв) 1 г., 5 г., 10г. порошку V_2O_5 при температурі суспензії 25°C .

Fig. 5. Temporal change in electrical conductivity of the solution during intensive mixing (500 rpm) of 1 g, 5g, 10g of V_2O_5 powder at a suspension temperature of 25°C .

SEM-аналіз (Рис. 6–7) дозволив фіксувати еволюцію морфології. Вихідний порошок представлений масивними агрегатами з неправильною формою (Рис. 6), тоді як після 72 годин перемішування при 500 об/хв утворюються видовжені стрічкоподібні наноструктури довжиною до 7 мкм, шириною 200–300 нм та товщиною близько 10–15 нм (Рис. 7).

Рентгеноструктурний аналіз (Рис. 8) підтвердив поступову зміну фазового стану. Через 24 години спостерігається виражений дифракційний пік, характерний для ортогональної фази V_2O_5 . Після 48 годин – помітне зниження інтенсивності піку, з подальшим зникненням кристалічних сигналів та домінуванням дифузного фону, що свідчить про перехід до нанокристалічної або аморфної структури (розмір частинок < 20 нм).

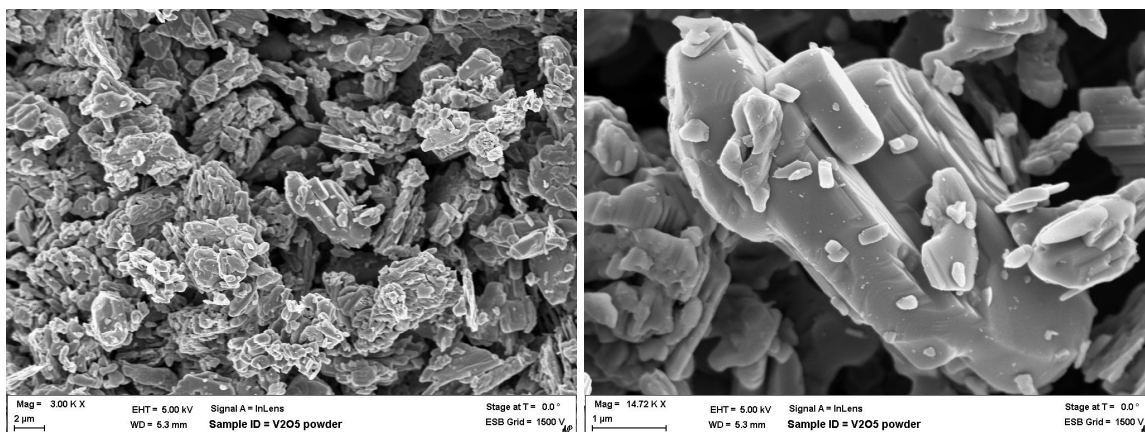


Рис. 6. PEM знімки вихідного порошку пентаоксиду ванадію.
Fig. 6. SEM images of the original vanadium pentoxide powder.

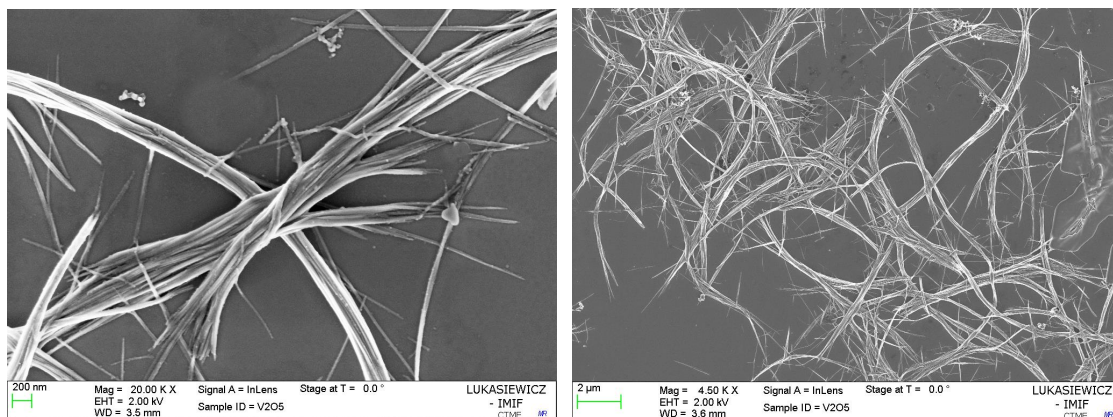


Рис. 7. Знімки утворених нанопоясів V_2O_5 при інтенсивному перемішуванні суспензії з частотою 500 об/хв при температурі 25°C .

Fig. 7. Photographs of the formed V_2O_5 nanobelts during intensive stirring of the suspension at a frequency of 500 rpm at a temperature of 25°C .

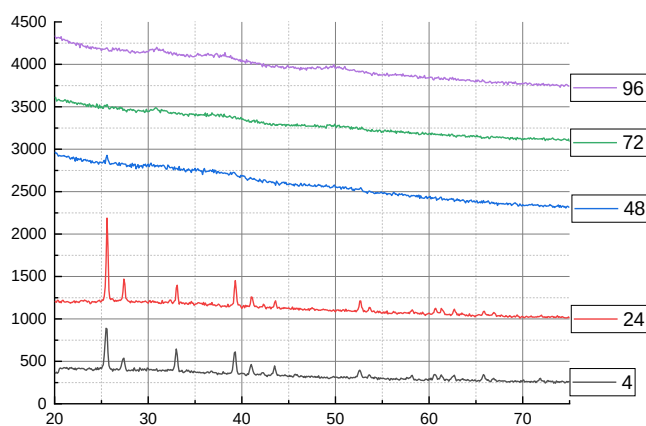


Рис. 8. Спектри рентгенівської дифрактометрії перетворення в нанопояси V_2O_5 при перемішуванні суспензії з частотою 500 об/хв при температурі 25°C протягом: 4 год, 24 год, 48 год, 72 год, 96 год.

Fig. 8. X-ray diffractometric spectra of transformation into V_2O_5 nanobelts with stirring of the suspension with frequency of 500 rpm at 25°C for: 4 hours, 24 hours, 48 hours, 72 hours, 96 hours.

Електрохімічні властивості оцінювали методом циклічної вольтамперометрії (CV) у розчині 1М KCl при швидкості сканування 50 mV/s у межах потенціалів від $-1,5$ В до $+1,5$ В. Для дослідження було виготовлено серію електродів: з чистим графітом, із нанесеним комерційним та подрібненим порошком V_2O_5 , з синтезованими нанострічками, а також композитний варіант (графіт/нанострічки у співвідношенні 1:1). На Рис. 9 показано, що композитний електрод продемонстрував найбільшу інтегральну площу CV-кривої та найвиразніші окисно-відновні піки, що свідчить про покращену питому ємність і ефективність переносу заряду.

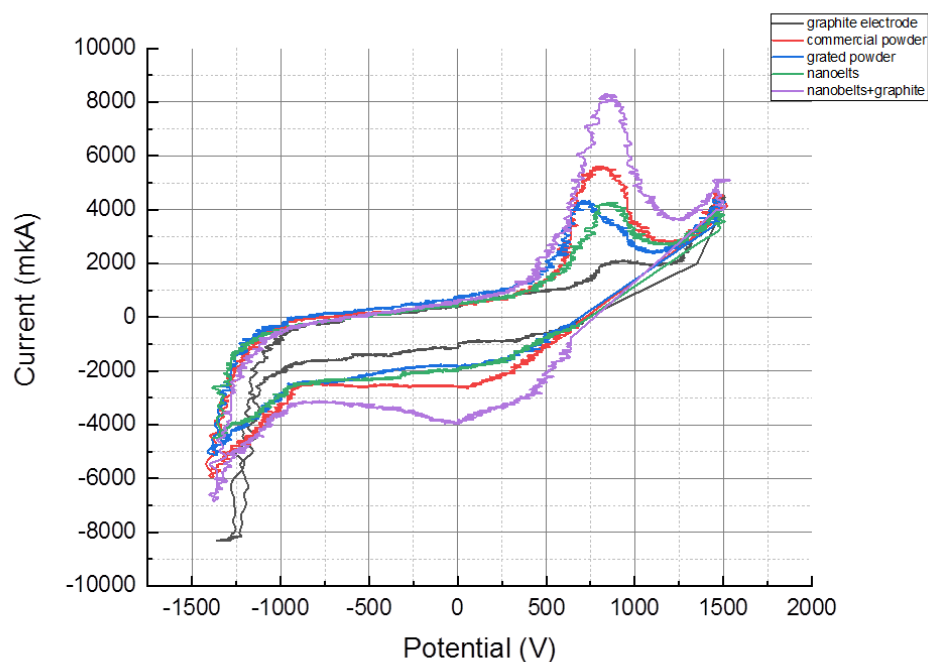


Рис 9. Криві циклічної вольтамперометрії (CV) виготовлених електродів з нанопоясів V₂O₅(графітовий електрод, комерційний порошок V₂O₅, подрібнений порошок V₂O₅, нанопояски, нанопояски з графітом (1:1))

Fig. 9. Cyclic voltammetry (CV) curves of manufactured electrodes from V₂O₅ nanobelts (graphite electrode, commercial V₂O₅ powder, crushed V₂O₅ powder, nanobelts, nanobelts with graphite (1:1))

Таким чином, проведені дослідження підтверджують можливість контрольованого синтезу наноструктур пентаоксиду ванадію шляхом варіювання основних параметрів процесу. Отримані результати можуть бути корисними для подальшого вдосконалення методів синтезу та розширення застосування отриманих наноматеріалів.

4. Висновки

У роботі проведено комплексне дослідження процесу синтезу нанострічок пентаоксиду ванадію (V₂O₅) в умовах гідромеханічного впливу. Встановлено, що інтенсивне перемішування в присутності NaCl як каталізатора забезпечує ефективну перекристалізацію комерційного порошку в одновимірні наноструктури без потреби у високотемпературній термообробці.

Зміна pH, в'язкості та потужності перемішування може слугувати непрямим індикатором етапів синтезу. Морфологічний аналіз підтвердив утворення видовжених нанопоясів із розмірами 10–15 нм у товщину та до 7 мкм у довжину. Рентгенівська дифрактометрія зафіксувала зменшення кристалічності продукту та перехід до нанокристалічного або аморфного стану.

Дослідження електрохімічних характеристик синтезованих наноструктур методом циклічної вольтамперометрії (CV) показало, що композитні електроди, виготовлені на основі графіту з додаванням синтезованих нанострічок V₂O₅, демонструють підвищену питому ємність і стабільність окисно-відновних характеристик. Це підтверджує доцільність використання одержаних наноматеріалів як катодних компонентів у літій-іонних батареях.

Отримані результати підтверджують ефективність використання гідромеханічного методу для синтезу наноструктур пентаоксиду ванадію та відкривають нові можливості для подальшої оптимізації процесу. Подальший розвиток методу та його адаптація до

умов масштабного виробництва можуть сприяти створенню високоефективних технологій синтезу наноматеріалів для застосування електроніці, системах накопичення енергії, сенсорних пристроях та інших перспективних галузях техніки.

Подяки

Автори висловлюють щирі вдячність професору Андрію Михайловичу Гусаку та Ярославу Дмитровичу Королю за цінну допомогу у постановці загальної задачі, змістовні дискусії та підтримку під час проведення експериментальних досліджень. Робота виконана за підтримки Міністерства освіти і науки України (номер державної реєстрації: 0121U113219).

Список використаної літератури:

1. Xianhong R. Ambient dissolution-recrystallization towards large-scale preparation of V₂O₅ nanobelts for high-energy battery applications / R. Xianhong, T. Yuxin, O. Malyi, A. Gusak, Zhang Y. // *Journal of Nano Energy*. – 2016. – V. 22. – P. 583-593. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.03.001>
2. Tang Y. Mechanical Force Driven Growth of Elongated Bending TiO₂ based Nanotubular Materials for Ultrafast Rechargeable Lithium Ion Batteries / Y. Tang, Y. Zhang, J. Deng, J. Wei // *Advanced Materials*. – 2014. – V. 26. – P. 6111-6118. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/adma.201402000>
3. Wang Z. L. Nanobelts, Nanowires, and Nanodiskettes of Semiconducting Oxides – From Materials to Nanodevices / Z. L. Wang // *Advanced Materials*. – 2003. – V. 15. – P. 432-436. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/adma.200390100>
4. Wei Pan Z. Nanobelts of Semiconducting Oxides / Z. Wei Pan, Z. Rong Dai, Z. Lin Wang // *Science*. – 2001. – V. 291. – P. 1947-1949. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1126/science.1058120>
5. Lee M. One-step hydrothermal synthesis of graphene decorated V₂O₅ nanobelts for enhanced electrochemical energy storage / M. Lee, S. K. Balasingam, H. Y. Jeong, Won G. Hong, Han-Bo-Ram Lee, B.yung H. Kim & Y. Jun // *Scientific Reports*. – 2015. – V. 8151– Режим доступу: <https://doi.org/10.1038/srep08151>
6. Gusak A. M. Application of ballistic jumps concept to formation of non-equilibrium anisotropic structures and to severe plastic deformation/, Y.I. Huriev, D.S. Gertsricken. // *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, . –2020. –P. 3-16. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-1-3-16>
7. Gusak A. M. Elementary models of the “flux driven anti-ripening” during nanobelt growth / A. M. Gusak, Y. I. Huriev, O. I. Malyi, Y. Tang. // *Physical Chemistry Chemical Physics*. –2020.–V. 22, No17.–P. 9740–9748.–Режим доступу:<https://doi.org/10.1039/C9CP06337D>
8. Gusak A. M. Anisotropic Nucleation, Growth and Ripening under Stirring—A Phenomenological Model / A. M. Gusak, Y. Huriev, J. W. Schmelzer. // *Entropy*. – 2020. –V. 22, No11. –P. 1254. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3390/e22111254>
9. Коломієць Д.І., Пасічний М.О., Король Я.Д. Гідротермічний метод синтезу нанопоясків оксиду ванадію V₂O₅ при інтенсивному перемішуванні // *Вісник Черкаського університету: Серія «Фізико-математичні науки»*. – 2020. – №1. – С. 53-58. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-53-58>
10. Коломієць Д.І., Пасічний М.О. Синтез нанопоясків оксиду ванадію та використання концепції балістичних стрибків для опису їх утворення // *Вісник Черкаського університету: Серія «Фізико-математичні науки»*. – 2021. – №1. – С. 12-31. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-12-31>

References:

1. R. Xianhong, T. Yuxin, O. Malyi, A. Gusak, Y. Zhang. (2016) Ambient dissolution-recrystallization towards large-scale preparation of V₂O₅ nanobelts for high-energy battery applications. *Journal of Nano Energy.* , 22, 583-593. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.03.001>
2. Y. Tang, Y. Zhang, J. Deng, J. Wei. (2014) Mechanical Force Driven Growth of Elongated Bending TiO₂ based Nanotubular Materials for Ultrafast Rechargeable Lithium Ion Batteries. *Advanced Materials.*, 26, 6111-6118. – Retrieved from <https://doi.org/10.1002/adma.201402000>
3. Z. L. Wang. (2003) Nanobelts, Nanowires, and Nanodiskettes of Semiconducting Oxides – From Materials to Nanodevices. *Advanced Materials.*, 15, 432-436. – Retrieved from <https://doi.org/10.1002/adma.200390100>
4. Z. Wei Pan, Z. Rong Dai, Z. Lin Wang. (2001) Nanobelts of Semiconducting Oxides. *Science.*, 291, 1947-1949. – Retrieved from <https://doi.org/10.1126/science.1058120>
5. M. Lee, S. K. Balasingam, H. Y. Jeong, Won G. Hong, Han-Bo-Ram Lee, B.yung H. Kim & Y. Jun. (2015) One-step hydrothermal synthesis of graphene decorated V₂O₅ nanobelts for enhanced electrochemical energy storage. *Scientific Reports.*, 8151– Retrieved from <https://doi.org/10.1038/srep08151>
6. A. M. Gusak, Y.I. Huriev, D.S. Gertsricken. (2020) Application of ballistic jumps concept to formation of non-equilibrium anisotropic structures and to severe plastic deformation *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 1, 3-16. – Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-1-3-16>
7. Gusak, A. M., Huriev, Y. I., Malyi, O. I., & Tang, Y. (2020). Elementary models of the “flux driven anti-ripening” during nanobelt growth. *Physical Chemistry Chemical Physics.*, 22(17), 9740-9748. – Retrieved from <https://doi.org/10.1039/C9CP06337D>
8. Gusak, A. M., Huriev, Y. I., & Schmelzer, J. W. (2020). Anisotropic Nucleation, Growth and Ripening under Stirring–A Phenomenological Model. *Entropy.*, 22(11), 1254. – Retrieved from <https://doi.org/10.3390/e22111254>
9. Kolomiets D.I., Pasichnyi M.O., Korol Y.D. (2020) Hydrothermal method of synthesis of nanobelts of vanadium oxide V₂O₅ with intensive mixing. *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 1 (1), 53-58. – Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-53-58>
10. Kolomiets D.I., Pasichnyi M.O. (2021) Synthesis of nanobelts of vanadium oxide and use of the concept of ballistic jumps to describe their formation. *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 1 (1), 12-31. – Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-12-31>

D. I. Kolomiets

PhD student of the Department of Physics, The Bohdan Khmelnytsky
National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
denyskolomiets95@gmail.com

M. O. Pasichnyy

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, Head of the
Department of Physics, The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy,
Cherkasy, Ukraine,
pasichnyy@ukr.net

SPECIFIC FEATURES OF HYDROMECHANICAL SYNTHESIS OF VANADIUM PENTAOXIDE NANOBELTS

This study offers a comprehensive analysis of the hydromechanical synthesis process for one-dimensional vanadium pentoxide (V_2O_5) nanobelts. The research aims to develop a scalable, ambient-condition methodology to produce nanostructured materials for advanced energy storage applications. Aqueous suspensions containing commercial V_2O_5 powder and varying concentrations of sodium chloride (NaCl) were subjected to intensive magnetic stirring without thermal post-processing. The experimental procedure involved monitoring the evolution of physicochemical properties over time, enabling detailed insight into the crystallization and growth behavior under turbulent liquid-phase conditions.

The evolution of the suspension's chemical and physical properties was monitored using measurements of pH, viscosity, and electrical conductivity. These indicators provided valuable insight into the reaction kinetics and nucleation dynamics. pH decreased progressively during the synthesis, signifying the acidification of the medium and possible hydrolysis reactions involving vanadium species. Simultaneously, viscosity increased, indicating the formation of extended molecular networks and colloidal intermediates. The observed changes in electrical conductivity confirmed the dissolution of V_2O_5 and the subsequent saturation of the solution. These changes serve as indirect indicators of the progress of nanostructure formation.

Morphological transformation during the synthesis was documented through scanning electron microscopy (SEM). The initial commercial V_2O_5 powder consisted of coarse particles with irregular shapes and low aspect ratios. After 72 hours of hydromechanical treatment, the formation of ribbon-like nanostructures was observed. These nanobelts displayed dimensions ranging from 10–15 nm in thickness and several microns in length, with smooth surfaces and apparent alignment. The observed anisotropic growth was likely governed by crystallization along preferred lattice directions, influenced by flow patterns and ion-mediated surface processes.

X-ray diffraction (XRD) analysis complemented the SEM observations. Initially, sharp diffraction peaks corresponding to the orthorhombic structure of V_2O_5 were present. With increasing treatment time, a decline in peak intensity and broadening of diffraction features were recorded. By the end of a 96-hour synthesis cycle, the crystalline signals had nearly vanished, and the patterns suggested a transition to a predominantly amorphous or nanocrystalline phase. These results underscore the mechanical disruption of long-range order induced by constant shear and collision forces in the suspension.

Electrochemical performance of the synthesized nanostructures was assessed using cyclic voltammetry (CV). Several electrode configurations were tested, including pristine graphite, graphite with untreated commercial powder, and composites with V_2O_5 nanobelts at different mass ratios. The composite electrode with a 1:1 mass ratio of graphite and nanobelts demonstrated the most favorable electrochemical behavior. Well-defined redox peaks, high reversibility, and increased charge-storage capacity were observed in comparison with reference electrodes.

Further analysis of the CV profiles revealed rapid ion insertion/extraction kinetics, enhanced by the high surface area and one-dimensional architecture of the nanobelts. These structures facilitated efficient ion transport and minimized resistance. Additionally, the uniform dispersion of nanostructures within the graphite matrix improved electronic connectivity and

mechanical integrity. The findings highlight the synergy between nanostructured V_2O_5 and conductive matrices in optimizing electrochemical performance.

Beyond energy storage, the synthesized V_2O_5 nanobelts exhibit promising characteristics for applications in chemical sensing, electrocatalysis, and photonic devices. Their high surface-to-volume ratio, redox activity, and structural flexibility make them suitable candidates for multifunctional systems. The ability to tune the synthesis parameters – such as salt concentration, stirring speed, and process duration-enables control over product morphology, crystallinity, and functional behavior.

The use of NaCl as a catalytic additive is of particular interest. It accelerates the breakdown of V_2O_5 agglomerates and promotes nucleation. The presence of chloride ions may alter the ionic strength and dielectric environment of the suspension, facilitating enhanced diffusion and templated growth. These effects warrant further investigation, particularly regarding ion-specific interactions and their implications for crystal engineering.

From a methodological perspective, the study showcases how mechanical forces—traditionally overlooked in crystallization – can direct nanoscale material formation under mild conditions. The interplay between turbulence, shear stress, and particle-solution interactions contributes to a new paradigm in low-temperature nanomaterials synthesis. This paradigm avoids complex autoclave systems or hazardous reagents, offering a sustainable alternative for industry and research.

The experimental framework developed here may be adapted to other metal oxide systems. For instance, analogous hydromechanical protocols could be applied to synthesize nanostructured TiO_2 , ZnO , or Fe_2O_3 . Moreover, the incorporation of dopants or functionalizing agents into the suspension could further expand the utility of the process. The hydromechanical route offers excellent compatibility with green chemistry principles, potentially reducing waste and energy consumption.

The findings also open avenues for integrating such nanomaterials into hybrid energy storage systems, such as supercapacitor–battery hybrids or solid-state cells. The scalability of the method, combined with its reproducibility and material efficiency, enhances its appeal for applied research and pre-industrial prototyping. Furthermore, the technique may be tailored for batch or continuous-flow processing, enabling production at various scales.

In summary, this study delivers an extensive characterization of a low-temperature, solution-based strategy for synthesizing V_2O_5 nanobelts. It demonstrates the critical role of hydrodynamic conditions and salt-mediated mechanisms in controlling the structure and performance of nanomaterials. The synthesized nanobelts exhibit favorable physical and electrochemical properties, confirming their suitability for energy-related technologies. The approach represents a significant advancement in scalable nanomaterials fabrication and paves the way for further studies in hydrodynamically controlled synthesis strategies.

Key words: nanostructures, nanobelts, metal oxides, vanadium pentoxide, hydrothermal method, nonequilibrium systems.

Одержано редакцією 15.07.2022

Прийнято до друку 26.08.2022

ORCID: 0000-0001-9227-2000

Ю. В. Ніколенко

аспірант кафедри фізики, ННІ ІНФОТЕХ,
Черкаський національний університет
імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,
nikolenkoyu960@gmail.com

ORCID: 0000-0002-4680-1466

В. В. Морозович

аспірант кафедри фізики, ННІ ІНФОТЕХ,
Черкаський національний університет
імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,
vladmorozua@gmail.com

ORCID: 0000-0001-7015-1662

Ю. О. Ляшенко

доктор фіз.-мат. наук, професор, ННІ ІНФОТЕХ
Черкаський національний університет
імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,
lyashenko.yurij@gmail.com

DOI: 10.31651/2076-5851-2022-15-22

PACS 52.80.-с 02.60.-х02.70.-с,
05.70.Fh, 05.70.Ln

РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЇ З'ЄДНАННЯ МІДНИХ КОНТАКТІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ЕЛЕКТРОКОНДУКТИВНОГО СПІКАННЯ МІДНИХ ПОРОШКІВ

Розроблено методику та проведено аналіз технології з'єднання мідних контактів за допомогою електроіскрового спікання суміші мідного і олов'яного порошків між мідними контактними пластинами. Проведено дослідження на растровому електронному мікроскопі РЕМ-200 контактної зони експериментальних зразків після електроіскрового спікання міжконтактної зони та після термічного відпалу дослідних зразків. Встановлено, що після процесу електроіскрового спікання, утворюється однорідна контактна зона.

Ключові слова: електроіскрове спікання, мідь, олово, порошкова суміш, растрова електронна мікроскопія.

1. Вступ

Порошкова металургія та процес спікання металевих порошків відіграють ключову роль у створенні мідних електричних контактів. Вибір методу спікання критично впливає на властивості та довговічність контактної області. У сфері виробництва мідних

контактів актуальним є технологічний аналіз особливостей електроіскрового спікання порівняно з термічними методами спікання за високих температур [1, 3].

Термічне спікання мідних порошків при високих температурах часто супроводжується технологічними викликами, зокрема, проблемами з окисленням металевих поверхонь, що погіршує електричну провідність і механічну міцність мідних контактів [4]. Також, високі температури можуть спричинити зростання зерен, що веде до утворення порожнин і неоднорідностей у структурі міжзеренного простору, що знижує якість і довговічність з'єднань.

Електроіскрове спікання дозволяє зменшити негативні фактори, за рахунок більш точного контролю області нагріву і скорочення часу спікання, що важливо для забезпечення якості та однорідності контактної зони. Цей метод також знижує вплив окислення міді і запобігає небажаному росту фаз, характерному для спікання при високих температурах [5, 6].

Однією з ключових переваг спікання суміші порошків міді та олова є створення більш однорідної та міцної структури матеріалу. Під час спікання олово діє як зв'язуючий агент, що сприяє рівномірному розподілу частинок міді та зменшенню утворення порожнин у кінцевій контактній зоні. Спікання суміші порошків міді та олова сприяє покращенню електричних властивостей мідних контактів та збільшує їх довговічність. Олово, змішуючись з міддю, формує сплав з високою електропровідністю та низьким рівнем опору, що є критично важливим для ефективної роботи електричних і електронних пристроїв [7, 8]. Спікання суміші порошків міді та олова демонструє більш високу технологічну ефективність у порівнянні з термічним спіканням. Метод дозволяє досягти бажаних властивостей матеріалу за менший час і з меншими енергетичним витратами, що робить його більш прийнятним для масового виробництва.

Врешті-решт, спікання суміші порошків міді та олова зменшує екологічний вплив виробництва, знижуючи викиди CO₂ та інших шкідливих речовин, що супроводжують традиційні високотемпературні процеси спікання. Це робить процес більш відповідним до сучасних екологічних стандартів, допомагаючи виробникам зменшити вуглецевий слід технологій [9,10].

Таким чином, застосування електроіскрового спікання суміші порошків міді та олова є технологічно ефективним, приводить до економії енергії, покращення якості продукції та збільшення екологічної стійкості, що робить його важливим методом у сучасному виробництві металевих деталей та компонентів.

В роботі проведено розробку та аналіз технології з'єднання мідних контактів за допомогою електроіскрового спікання, спікання суміші порошків міді і олова що необхідно, для досягнення оптимальних характеристик міжконтактного з'єднання [11].

2. Опис експерименту

Для проведення експерименту із електроіскрового спікання суміші мідного та оловяного порошків були попередньо підготовлені мідні пластини розміром 5*5 мм. Процес шліфування і полірування мідних пластинок проходив в декілька етапів. Було використано шліфувальні круги P180-P2400. Після кожного етапу полірування зразки піддавались очищенню в ультразвуковій ванні. Для виготовлення зразків використовувалась суміш порошків міді та олова.

Використання обладнання для контактної-точкової зварки ТКС-1300 було ключовим у процесі виробництва мідних контактів шляхом електроіскрового спікання порошків. Застосовані параметри для цього експерименту: струм у 1300А, напруга в 2В. Контактна зона формувалася шляхом створення відповідної сендвіч-структури, де дві мідні пластини розміром 5х5 мм були розділені непровідним ізоляційним матеріалом із товщиною 250 мкм, у якому був круговий отвір з діаметром 2 мм. Цей отвір слугував контейнером для порошку, що розподілявся у ньому рівномірно. Ціль ізолятора полягала в забезпеченні проходження електричного струму лише через зону спікання, що охоплювала мідні пластини та порошок, забезпечуючи точну локалізацію протікання процесу спікання [див. Рис.1].

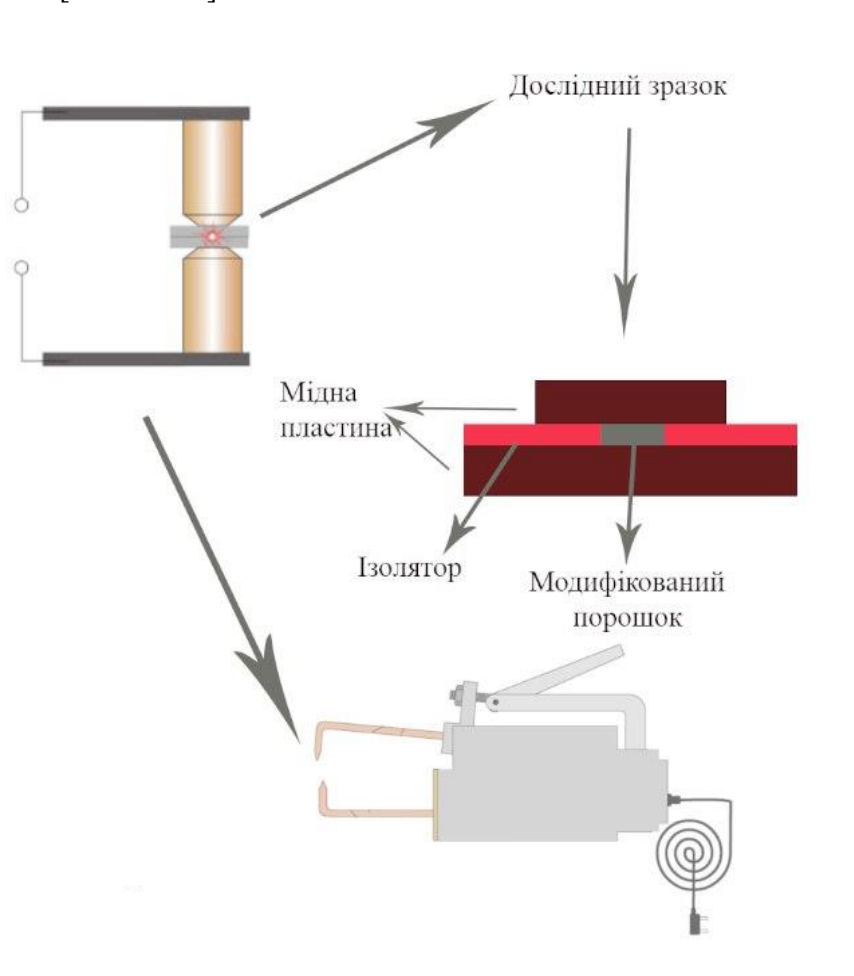


Рис. 1. Схематичне зображення процесу електроіскрового спікання

Fig. 1. Schematic representation of electric spark sintering

Процедура електроіскрового спікання для виготовлення мідних контактів проходила в кілька етапів: спочатку зразки фіксувались між електродами з легким стисненням, далі на них подавався короточасний електроіскровий із параметрами, зазначеними раніше. Завдяки такій процедурі досягається формування зразків з високою механічною міцністю в області контакту.

3. Результати дослідження виготовлених зразків

Дослідження крос секції контактної зони експериментальних зразків після електроіскрового спікання проводилося на растровому електронному мікроскопі РЕМ-

200. Знімки контактної зони отримувались за збільшення в 30 разів (Рис. 2-3.) та 400 разів (Рис. 4).

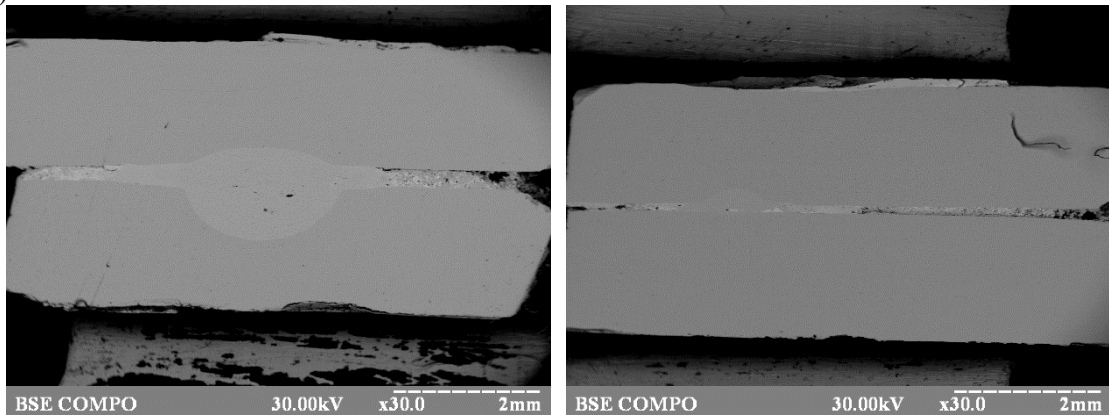


Рис. 2. СЕМ-зображення контактної зони після електроіскрового спікання.

Fig. 2. SEM image of the contact zone after electric spark sintering.

Додатково, щоб дослідити процес фазо- та пороутворення в контактній зоні, зразки було зістарено в атмосфері аргону протягом 6 годин за температури 500 °С.

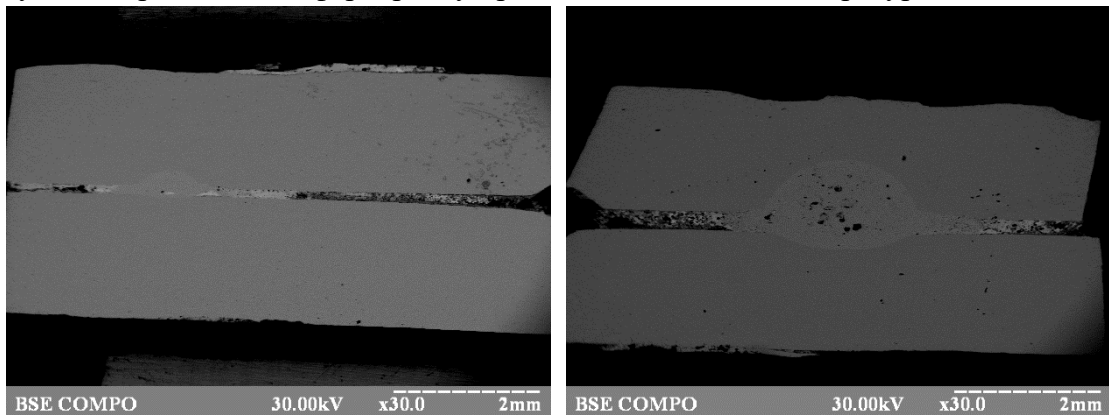
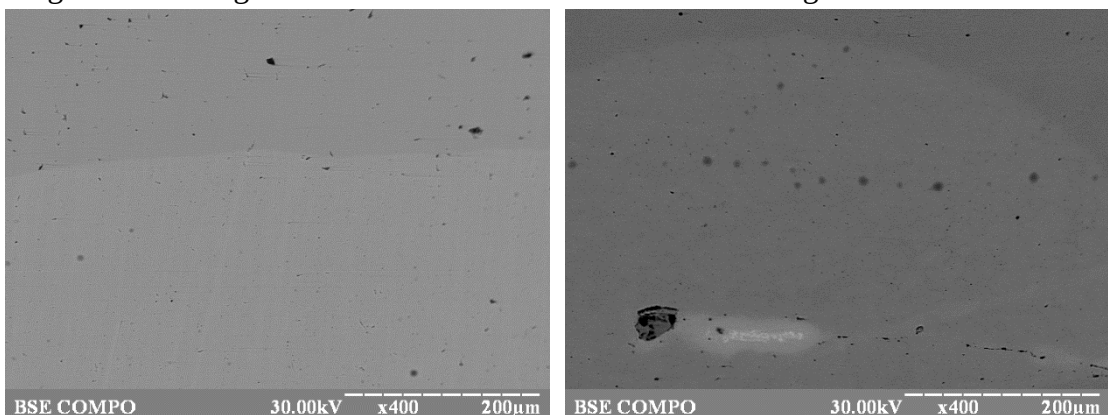


Рис. 3. СЕМ-зображення контактної зони після термічного відпалу протягом 6 годин за температури 500 °С.

Fig. 3. SEM image of the contact zone after thermal annealing for 6 hours at 500 °C.



а

б

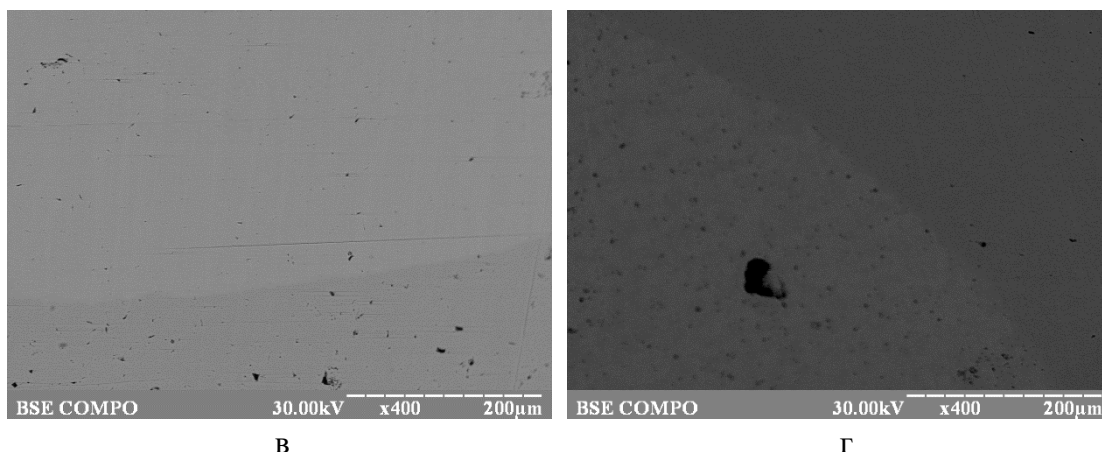


Рис. 4. СЕМ-зображення контактної зони дослідних зразків після електроіскрового спікання (а,в) та після термічного відпалу (б,г)

Fig. 4. SEM images of the contact zone of the experimental samples after electric spark sintering (a,b) and after thermal annealing (b,g)

Аналіз СЕМ-зображення контактної зони дослідних зразків

Якісний аналіз СЕМ зображень на Рис. 2 та Рис. 3, дозволяє зробити висновок, що в зоні електроіскрового спікання утворюється суцільна контактна зона. Після термічного відпалу зона контакту є суцільною. На СЕМ-зображеннях контактної зони дослідних зразків (Рис. 4.) із градації відтінків сірого видно, що в місці спайки утворилася двофазна зона Cu та Cu_6Sn_5 .

4. Висновки

В результаті електроіскрового спікання суміші мідного та олов'яного порошоків між мідними контактними пластинами утворюється однорідна контактна зона, стійка до механічних пошкоджень.

В результаті термічного відпалу протягом 6 годин за температури 500 °C можна стверджувати про те, що в контактній зоні відбувається ріст фази та зростає концентрація пустот на одиницю площі поверхні контактної зони зразка. Аналіз дифрактограм та СЕМ-зображень дозволяє зробити висновок, що в контактній зоні дослідних зразків утворюється двофазна зона Cu та Cu_6Sn_5 .

Список використаної літератури:

1. Rogeon P. Characterization of electrical contact conditions in spot welding assemblies / P. Rogeon, P. Carre, J. Costa, G. Sibilia, G. Saindrenan // Journal of Materials Processing Technology. – 2008. – Vol. 195, No. 1-3. – P. 117-124. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2007.04.127>
2. Walker I. R. Spot welder for making small electrical contacts / I. R. Walker, C. J. Moss // Review of scientific instruments. – 1998. – Vol. 69, No. 7. – P. 2747-2756. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1149010>
3. Babu S. S. Empirical model of effects of pressure and temperature on electrical contact resistance of metals. Science and technology of welding and joining / S. S. Babu, M. L. Santella, Z. Feng, B. W. Riemer, J. W. Cohron // Science and technology of welding

- and joining. – 2001. – Vol. 6, No. 3. – P. 126-132. – Режим доступу: <http://dx.doi.org/10.1179/136217101101538631>
4. Chang B. H. Comparative study of small scale and 'large scale' resistance spot welding / B. H. Chang, M. V. Li, Y. Zhou // Science and technology of welding and joining. – 2001. – Vol. 6, No.5. – P. 273-280. – Режим доступу: https://www.researchgate.net/profile/Yixiang-Zhou-/publication/233709906_Comparative_study_of_small_scale_and_'large_scale'_resistance_spot_welding/links/5db2ffe84585155e270104a5/Comparative-study-of-small-scale-and-large-scale-resistance-spot-welding.pdf
5. Wei P. S. Electrical contact resistance effect on resistance spot welding / P. S. Wei, T. H. Wu // International journal of heat and mass transfer. – 2012. – Vol. 55, No. 11-12. – P. 3316-3324. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.01.040>
6. Walker I. R. Further considerations on the preparation of small electrical contacts by spot welding / I. R. Walker, C. J. Moss // Review of Scientific Instruments. – 2000. – Vol. 71, No. 5. – P. 2228-2232. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1150611>
7. Feulvarch E. Resistance spot welding simulation: a general finite element formulation of electrothermal contact conditions / E. Feulvarch, V. Robin, J. M. Bergheau // Journal of Materials Processing Technology. – 2004. – No. 153. – P. 436-441. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1150611>
8. Wang S. C. Modeling dynamic electrical resistance during resistance spot welding / S. C. Wang, P. S. Wei // J. Heat Transfer. – 2001. – Vol. 123, No. 3. – P. 576-585. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1115/1.1370502>
9. Na S. J. A theoretical study on electrical and thermal response in resistance spot welding / S. J. Na, S. W. Park // Welding Journal-Including Welding Research Supplement. – 1996. – Vol. 75, No. 8. – P. 233-242. – Режим доступу: https://s3.us-east-1.amazonaws.com/WJ-www.aws.org/supplement/WJ_1996_08_s233.pdf
10. Zhang X. Effect of electrical load on contact welding failure of silver tin oxide material used in DC electromechanical relays / X. Zhang, W. Ren, Z. Zheng, S Wang // IEEE Access. – 2019. – No. 7. – P. 133079-133089. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2940966>
11. Ніколенко Ю. В. Вплив ультразвуку на процес хімічного осадження олова на мідний порошок / Ю. В. Ніколенко, В. В. Морозович, Ю. О. Ляшенко // Вісник Черкаського університету. Серія: «Фізико-математичні науки» – 2021. №1. – С. 90-99. Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-90-99>

References:

1. Rogeon, P., Carre, P., Costa, J., Sibilia, G., & Saindrenan, G. (2008). Characterization of electrical contact conditions in spot welding assemblies. Journal of Materials Processing Technology, 195(1-3), 117-124. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2007.04.127>

2. Walker, I. R., & Moss, C. J. (1998). Spot welder for making small electrical contacts. Review of scientific instruments, 69(7), 2747-2756. Retrieved from <http://doi.org/10.1063/1.1149010>
3. Babu, S. S., Santella, M. L., Feng, Z., Riemer, B. W., & Cohron, J. W. (2001). Empirical model of effects of pressure and temperature on electrical contact resistance of metals. Science and technology of welding and joining, 6(3), 126-132. Retrieved from <http://dx.doi.org/10.1179/136217101101538631>
4. Chang, B. H., Li, M. V., & Zhou, Y. (2001). Comparative study of small scale and 'large scale' resistance spot welding. Science and technology of welding and joining, 6(5), 273-280. Retrieved from https://www.researchgate.net/profile/Yixiang-Zhou-2/publication/233709906_Comparative_study_of_small_scale_and_'large_scale'_resistance_spot_welding/links/5db2ffe84585155e270104a5/Comparative-study-of-small-scale-and-large-scale-resistance-spot-welding.pdf
5. Wei, P. S., & Wu, T. H. (2012). Electrical contact resistance effect on resistance spot welding. International journal of heat and mass transfer, 55(11-12), 3316-3324. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.01.040>
6. Walker, I. R., & Moss, C. J. (2000). Further considerations on the preparation of small electrical contacts by spot welding. Review of Scientific Instruments, 71(5), 2228-2232. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.1150611>
7. Feulvarch, E., Robin, V., & Bergheau, J. M. (2004). Resistance spot welding simulation: a general finite element formulation of electrothermal contact conditions. Journal of Materials Processing Technology, 153, 436-441. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.1150611>
8. Wang, S. C., & Wei, P. S. (2001). Modeling dynamic electrical resistance during resistance spot welding. J. Heat Transfer, 123(3), 576-585. Retrieved from <https://doi.org/10.1115/1.1370502>
9. Na, S. J., & Park, S. W. (1996). A theoretical study on electrical and thermal response in resistance spot welding. Welding Journal-Including Welding Research Supplement, 75(8), 233-242. Retrieved from https://s3.us-east-1.amazonaws.com/WJ-www.aws.org/supplement/WJ_1996_08_s233.pdf
10. Zhang, X., Ren, W., Zheng, Z., & Wang, S. (2019). Effect of electrical load on contact welding failure of silver tin oxide material used in DC electromechanical relays. IEEE Access, 7, 133079-133089. Retrieved from <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2940966>
11. Nikolenko, Yu. V., Morozovych, V. V., Lyashenko Yu. O. (2021). Effect of ultrasound on the process of chemical deposition of tin on copper powder. *Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriya «Fizyko-Matematychni Nauky»* (Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics"), (1), 90-99. Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-90-99>

Yu. V. Nikolenko

Post-graduate student of the Department of Physics,
The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
nikolenkoyu960@gmail.com

V. V. Morozovych

Post-graduate student of the Department of Physics,
The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
vladmorozua@gmail.com

Yu. O. Lyashenko

doctor of physical and mathematical sciences, professor,
Educational-Scientific Institute of Informational and Educational Technologies
The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
lyashenko.yurij@gmail.com

**DEVELOPMENT OF A TECHNOLOGY FOR CONNECTING COPPER
CONTACTS BY MEANS OF ELECTROCONDUCTIVE SINTERING OF
COPPER POWDERS**

Powder metallurgy and the sintering of metal powders play an important role in the production of copper contacts. However, the choice of sintering method has a significant impact on the quality and reliability of the contact zone. In the context of copper contact production, it is particularly important to consider the advantages of electrospark sintering compared to traditional temperature sintering methods

This article focuses on the development and analysis of the technology for joining copper contacts using electrospark sintering of mixture of copper and tin powders to achieve optimal interconnect characteristics. In this article, a scanning electron microscope (SEM-200) was used to examine the contact zone of the experimental samples after electric spark sintering. It was found that after the electrospark sintering process, a stable contact zone is formed in the case of copper and copper-tin powders.

From the results of the analysis of the contact zone, it can be said that after thermal annealing exist the intermediate phase growth and pore formation, the concentration of voids per unit surface area of the contact zone.

Key words: electric spark sintering, copper, tin, powder mixture, scanning electron microscopy.

Одержано редакцією 02.09.2022

Прийнято до друку 15.10.2022

ORCID: 0000-0002-4950-394X

А. Р. Гонда

аспірант, ННІ ІНФОТЕХ

Черкаський національний університет

імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,

andriy.gonda@vu.cdu.edu.ua

ORCID: 0000-0001-7015-1662

Ю. О. Ляшенко

доктор фіз.-мат. наук, професор, ННІ ІНФОТЕХ

Черкаський національний університет

імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,

lyashenko.yuriy@gmail.com

DOI: 10.31651/2076-5851-2022-23-32

PACS 05.70.Fh, 05.70.Ln,

02.60.-x, 02.60.Pn

ДОСЛІДЖЕННЯ МОРФОЛОГІЇ КОНТАКТНОЇ ЗОНИ СПАЙНИХ КОНТАКТІВ МІДІ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ СЕГМЕНТАЦІЇ ЗОБРАЖЕНЬ СТРУКТУРНИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ ВЕЙВЛЕТ ПЕРЕТВОРЕННЯ

Морфологію контактної зони спайних контактів міді проаналізовано з застосуванням алгоритмів текстурної сегментації зображень та бібліотеки OpenCV. Розглянуто основні підходи до виділення міжфазних меж засобами графічної бібліотеки OpenCV та застосування фільтра Габора для виділення контурів пор, детектування дефектів та пор на інтерфейсах, встановлення співвідношень фаз контактної зони. Удосконалено процедуру текстуровання зображень для зображень растрової електронної мікроскопії. Розраховано площі фаз на інтерфейсах дифузійних зон системи Cu-Sn для зразків, що отримані за різних режимів електроосадження міді: стаціонарного, імпульсного-реверсного, стохастичного. Удосконалено процедуру аналізу площ фаз. Застосовано процедуру текстурної сегментації для зображень, амплітуда інтенсивності градацій сірого кольору в яких співрозмірна з амплітудою шуму градацій сірого кольору. На зображеннях растрової електронної мікроскопії за допомогою розроблених алгоритмів текстуровано елементи ламелярної структури в фазово неоднорідному сплаві.

Ключові слова: фазовий склад, дифузійна зона, мідь, олово, растрова електронна мікроскопія, алгоритми обробки зображень, вейвлет-перетворення, OpenCV.

1. Вступ

Однією з ключових складових сучасних технологій є забезпечення надійного з'єднання між елементами електронних пристроїв. Саме тут на перший план виходить проблема створення спайних контактів системи Cu-Sn, що є невід'ємною частиною ефективного функціонування електронних приладів [4].

Порошкова металургія та спікання металевих порошків відіграють ключову роль у виготовленні мідних контактів. Проте, вибір методу спікання суттєво впливає на якість та надійність контактної зони.

Для аналізу мікрофотографій, що отримані методом растрової електронної мікроскопії (РЕМ), розроблені алгоритми попередньої обробки зображень, алгоритми текстурної сегментації зразків та визначення характеристик пористості контактної зони [5]. В даному дослідженні розроблені алгоритми [5] удосконалені для дослідження морфології та фазового складу торцевих зрізів зразків контактної зони, що утворена в результаті електроіскрового спікання порошків міді та олова, застосовані розроблені алгоритми комп'ютерного аналізу.

Растрова електронна мікроскопія (REM) надає можливість отримання високоякісних зображень мікроструктури контактної зони з високою роздільною здатністю. Однак, обробка та аналіз цих зображень вручну може бути часо- та працезатратною процедурою, а також схильною до помилок людського сприйняття. У цьому контексті застосування алгоритмів комп'ютерного зору та бібліотеки OpenCV стає цінним інструментом стандартизованого аналізу. OpenCV - це відкрите програмне забезпечення з великою кількістю функцій для обробки зображень та комп'ютерного зору. Використання OpenCV для аналізу мікрофотографій контактної зони зразків надає можливість автоматизувати процеси обробки та аналізу, зменшуючи час, потрібний для отримання результатів, і знижуючи ймовірність помилок.

Для аналізу типу та розподілу топологічних дефектів в зразках та визначення чітких меж фаз на мікрофотографії важливим є використання алгоритмів, що дозволяють чітко детектувати границі колірного градієнту між різними фазовими неоднорідностями на РЕМ-зображеннях.

В роботі проведено аналіз існуючих та розроблено нові алгоритми обробки зображень контактної зони зразків на основі мідно-олов'яних сплавів, що отримані засобами растрової електронної мікроскопії.

2. Опис алгоритму текстурної сегментації зображень

Зображення зразків, що отримані методами растрової електронної мікроскопії, відображають інтенсивність взаємодії електронів з поверхнею зразка у вигляді зображень в градаціях сірого кольору. Як відомо, для кодування зображень в градаціях сірого можливо використати один байт на піксель, що відповідає значенням градацій сірого кольору в межах від 0 до 255. Оскільки в ході фіксації зображення електронної мікроскопії існують похибки вимірювань, отримані зображення необхідно додатково корегувати, наприклад із застосуванням згорткового фільтра Гауса, або нерізкого розмиття, що носить назву білатеральної фільтрації [1]. Згорткові фільтри дозволяють згладити локальні градієнти градацій сірого кольору. Для текстурної сегментації зображень та пошуку меж фаз на мікрофотографіях зразків необхідною умовою є наявність контрасту фаз, але особливості отримання знімків засобами електронної мікроскопії включають наявність шумів у отриманих зображеннях, що перешкоджає достовірному аналізу. Приклад зображення контактної зони, що отримано в режимі відбитих вторинних електронів, приведено на Рис 1.

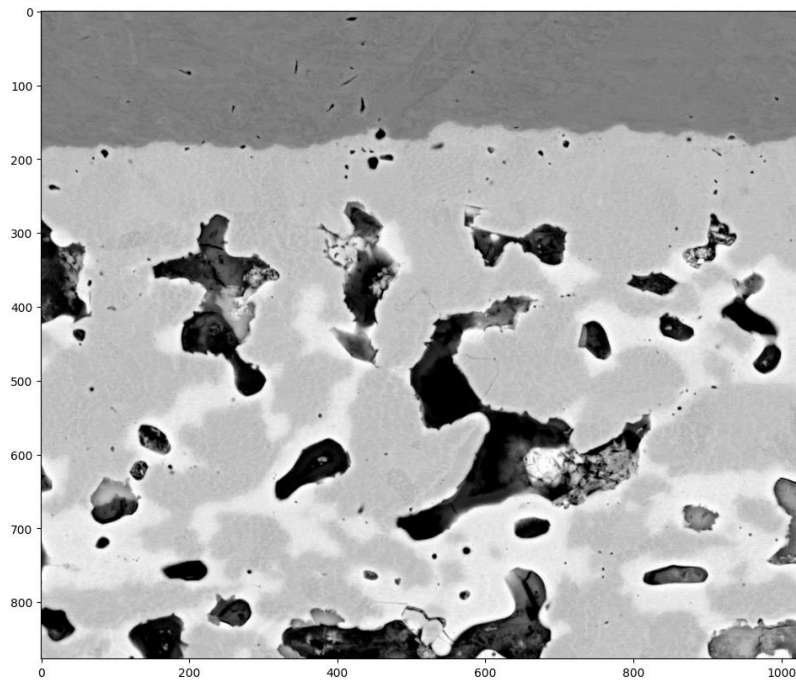


Рис. 1. РЕМ-зображення контактної дифузійної зони.

Fig.1. SEM image of the contact diffusion zone.

Безпосередньо зона спікання порошкових сумішей після відпалу містить ознаки наявності певних фаз за допомогою яких і формується електричний контакт в результаті спікання порошків. Оскільки на РЕМ зображеннях дефекти контактної дифузійної зони (пори, та конгломерати пор) можуть бути представлені як замкнені контури пікселів, які перешкоджають аналізу площ фаз, для відокремлення замкнених контурів було використано фільтр Габора, що являє собою двовимірний згортковий фільтр на основі вейвлету Габора [1]. Даний алгоритм широко використовується в аналізі оптичних дактилоскопічних сканів, де необхідне уточнення границь відбитків пальців [3]. Фільтр Габора був використаний нами для відокремлення контактної зони від дефектів контактної дифузійної зони (пор, та конгломератів пор), що дозволило покращити контраст інтерфейсів в дифузійній контактній зоні.

Отримане шляхом фільтрації зображення контактної зони з використанням фільтру Габора приведено на Рис. 2.

Тут, послідовність етапів обробки зображень, що отримані засобами растрової електронної мікроскопії, є наступною:

- 1) Зображення у форматі bmp завантажується у програму з файлової системи;
- 2) Зображення конвертується в колірний простір градацій сірого в діапазоні від 0..255, де 0 відповідає чорному кольору, 255 - білому;
- 3) Опціонально застосовується фільтр Гауса з розміром вікна 3x3 пікселі;
- 4) Оскільки зображення дифузійного профілю містить дефекти у формі пор та порожнин, які на знімках растрової електронної мікроскопії мають характерний колір близький до чорного, до зображення застосовується вейвлет-фільтр Габора (налаштування фільтру можна корегувати) для уточнення границь фаз в певному колірному діапазоні (опційно можна регулювати);

- 5) Для відфільтрованого зображення будується діаграма розподілу кольорів, згідно, наприклад[4];
- 6) За колірною діаграмою в ручному режимі користувач вибирає діапазони градацій сірого для кожної з фаз користуючись діапазоном діаграми розподілу інтенсивності градацій сірого кольору;
- 7) Для всіх пікселів зображення, які входять до вибраних діапазонів градацій сірого кольору, значення кольору змінюється на фіксоване (з кроком в 50 градацій сірого для кожної з фаз).
- 8) В результаті текстурування отримуємо кореговане зображення, що використовується для подальшого аналізу розподілу фаз в контактній зоні, до прикладу розрахунку площі фаз на зображенні із застосуванням масштабуючого коефіцієнта.

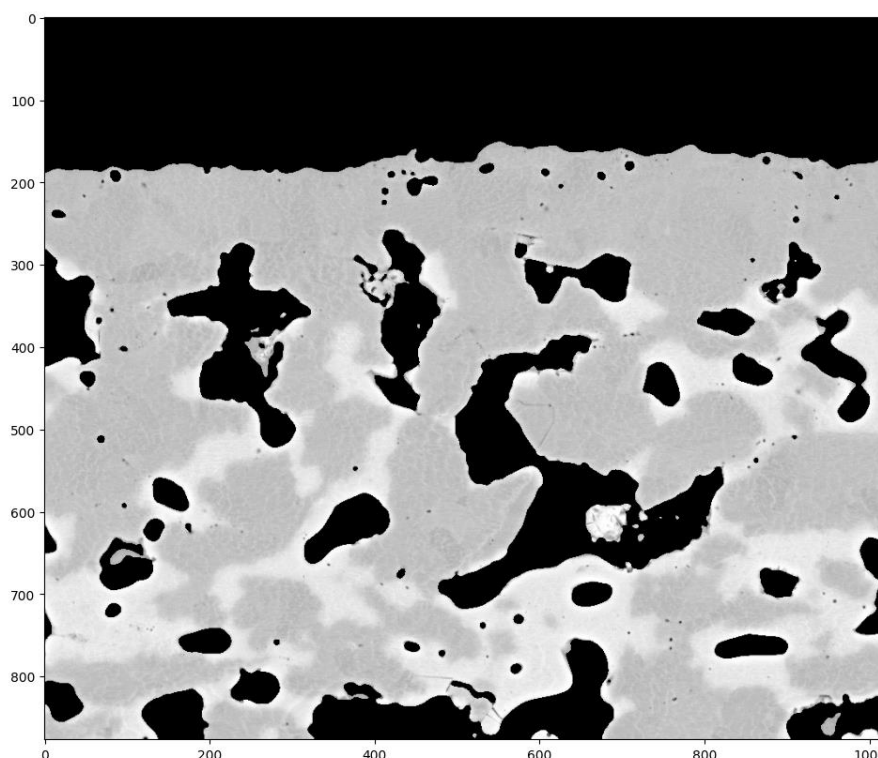


Рис.2. Результат використання фільтру Габора для зображення контактної зони з рис.1.

Fig. 2. The result of applying Gabor filtering to image of contact zone from the fig.1.

Оскільки зображення неоднорідне за кольором, необхідно побудувати колірну гістограму розподілу градацій сірого. Тут, за відокремленими піками інтенсивності градацій сірого кольору із гістограми розподілу градацій сірого кольору, можна судити про існування діапазонів градацій сірого кольору діапазонів фаз, однак тепер місця, що відповідають за дефекти полірування або пористість можуть бути виключені з аналізу площ фаз на зображеннях контактної зони. Задаючи діапазони градацій сірого кольору, які відповідають межі інтенсивності конкретної фази, можна ефективно визначати площі фази в контактній зоні.

Зображення, приведені на Рис. 1. та Рис 2. дозволяють провести аналіз за допомогою алгоритмів комп'ютерного зору на наявність характерної для розпаду сплавів ламелярної структури, яку досить важко відокремити алгоритмами обробки зображень.

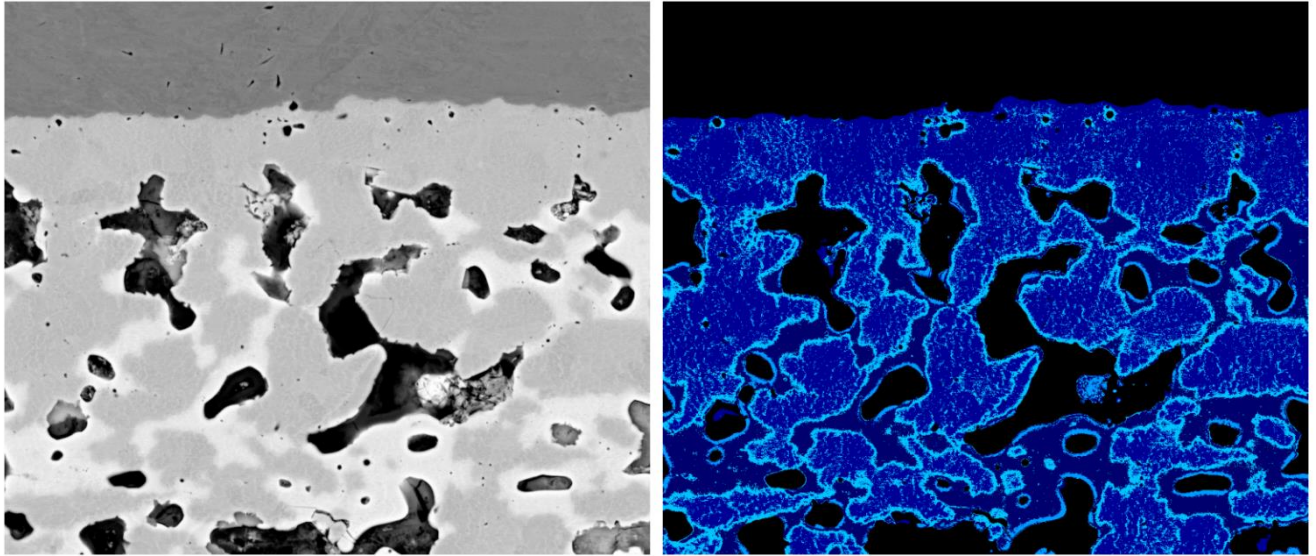


Рис.3. Початкове (зліва) та текстуроване зі зміненою колірною палітрою (справа) зображення контактної зони.

Fig. 3. Source image of contact zone (left side) and textured image (right side) with changed color palette.

Як зображено на Рис. 3., алгоритм дозволяє відокремити навіть елементи ламелярної структури сплаву, що розпадається та значно підсилити контраст відповідних ділянок. Застосування фільтру Габора дозволяє зменшити похибку на дефектних ділянках контактної зони завдяки застосуванню ефективного алгоритму пошуку меж де наявний різкий перехід між градаціями сірого кольору.

3. Застосування текстурної сегментації для уточнення розрахунку площ фаз

Запропонований алгоритм було застосовано для аналізу РЕМ зображень зразків, що виготовлені за методикою [4]. Всього було опрацьовано зображення контактних зон системи Cu-Sn для 5 зразків. Для виготовлення дифузійних зразків Cu-Sn застосовувалися модифіковані мідні пластини на які попередньо осаджувалася мідь в різних режимах електроосадження, потім здійснювався відпал дифузійних пар Cu-Sn. Попередньо всі отримані РЕМ зображення контактної зони були згладжені за допомогою алгоритму фільтрації за Гаусом для забезпечення більш стабільної колірної картини в градаціях сірого кольору. Розрахунок площ проміжних фаз Cu_6Sn_5 та Cu_3Sn проводився для зображень контактних зон, що містили наступні фази: Cu, Sn, Cu_6Sn_5 , Cu_3Sn .

Засобами графічної бібліотеки OpenCV був застосований фільтр Габора з наступними параметрами ядра фільтрації: **frequency=0.01, theta=0, sigma_x=sigma_y=1, bandwidth=1, n_stds=1.**

Колірні діапазони фаз вибирались вручну згідно з алгоритмом колірної гістограми, що описані в [5].

Всі зображення попередньо були конвертовані в зображення з градаціями сірого кольору, тобто містили лише один колірний канал з межами від 0 до 255.

Результат застосування фільтрації Габора для уточнення границь дефектів показано на Рис 4.

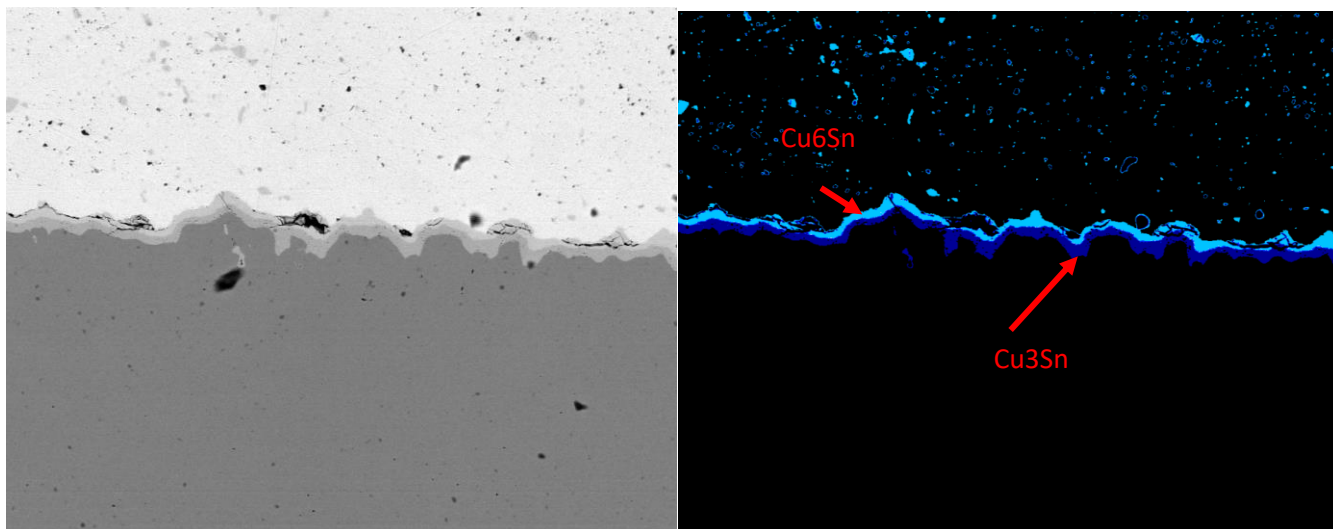
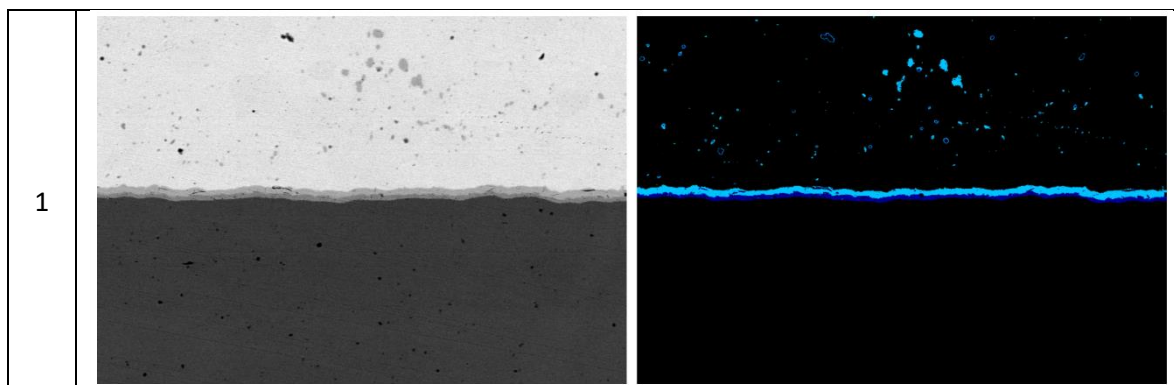


Рис.4. Початкове (зліва) та текстуроване зі зміненою колірною палітрою (праворуч) зображення дифузійного інтерфейсу.

Fig. 4. Source image of diffusion zone (left image) and textured image (right image) with changed color palette.

Використання алгоритму текстурної сегментації фаз дозволяє ефективно розрахувати площі фаз з аналізу зображень зразків. Для досліджених зразків, зображення яких приведені на Рис. 5, в Таблиці 1 подані відомості про результати обробки зображень. В Таблиці 1 подано відомості про розраховані площі фаз Cu_6Sn_5 та Cu_3Sn в кожному з режимів електроосадження міді, що описані в [4].

Запропонований алгоритм текстурної сегментації дозволяє обробити зображення з РЕМ для розрахунку співвідношення площ фаз без урахування дефектних, неоднорідних ділянок (пор та конгломератів пор), які засобами електронної мікроскопії фіксуються на растрових зображеннях у вигляді замкнутих контурів з вираженим зменшенням інтенсивності сірого кольору. Виключення цих ділянок з аналізу дозволяє уточнити розрахунок площ фаз проміжних фаз із зображень.



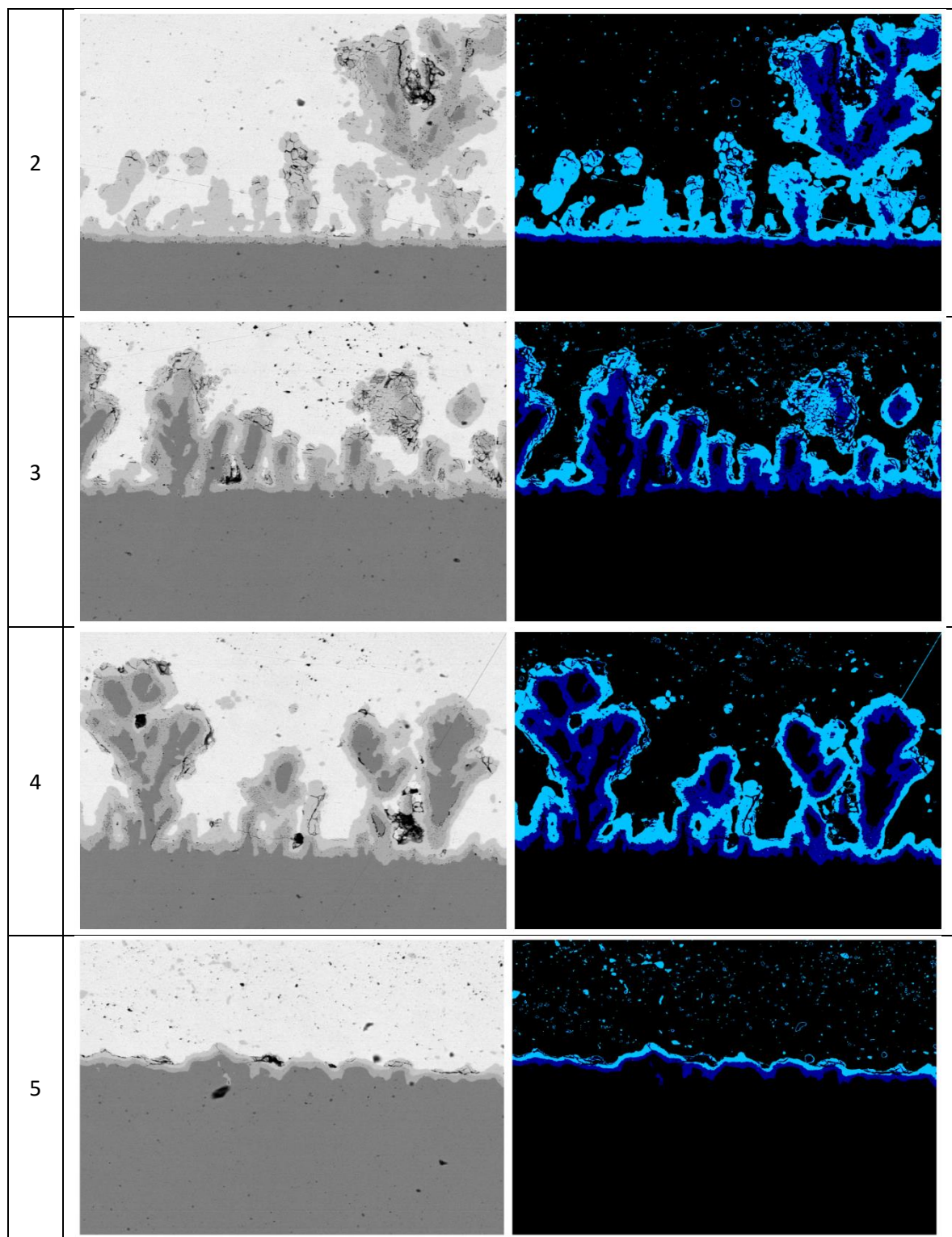


Рис. 5. Вихідне зображення та результат текстурної сегментації фрагментів зображень фаз Cu_6Sn_5 та Cu_3Sn із застосуванням фільтрації Габора.

Fig. 5. Source image and texture segmentation image result for intermediate phases Cu_6Sn_5 and Cu_3Sn by applying Gabor filtering.

Таблиця 1. Розраховані площі проміжних фаз на основі зображень текстурної сегментації.

Table 1. Calculated intermediate phases areas based on texture segmentation images.

№ зразка	Площа фази Cu ₆ Sn ₅ , мкм ²	Площа фази Cu ₃ Sn, мкм ²	Співвідношення площ фаз Cu ₆ Sn ₅ /Cu ₃ Sn
1	31260	16965.33	1.84
2	314634.67	132149.33	2.38
3	166004	150484	1.1
4	201801.33	185592	1.09
5	41592	34089.33	1.22

4. Висновки

Розроблений алгоритм текстурної сегментації з використанням вейвлет-фільтру Габора дозволяє текстурувати ділянки, які притаманні дефектним структурам (пор, порожнин, конгломератів пор) та які проявляються на зображеннях РЕМ у вигляді замкнених контурів зі зниженою інтенсивністю градацій сірого кольору порівняно з середнім показником інтенсивності сірого кольору вихідного зображення.

Алгоритм текстурної сегментації дозволяє чітко визначати ділянки, де можливі незначні зміни градацій сірого кольору, що дозволяє визначати малі зміни кольору, які на зображеннях РЕМ дифузійних зразків сплавів, що розпадаються, можуть проявлятися у вигляді ламелярної структури.

Використання фільтру Габора дозволяє більш точно визначити границі різних фаз та розраховувати площі фаз навіть за умов, коли застосування згладжування за Гаусом неможливе, оскільки зображення дифузійного інтерфейсу може містити ділянки проміжних фаз співрозмірних з розміром вікна розмиття за Гаусом.

Використання білатеральної фільтрації, або розмиття за Гаусом у поєднанні з вейвлет-фільтром Габора дозволяє отримати більш чіткі зображення меж фаз та пор де присутній градієнт градацій сірого кольору в зображеннях низької якості.

5. Список використаної літератури:

1. LEE, Tai Sing. Image representation using 2D Gabor wavelets // IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence. 1996. Т. 18, № 10. С. 959-971.
2. Mehrotra, R., Namuduri, K. R., Ranganathan, N. Gabor filter-based edge detection // Pattern recognition. 1992. Т. 25, № 12. С. 1479-1494.
3. Dolezel, M., Hejtmankova, D., Busch, C., Drahansky, M. Segmentation procedure for fingerprint area detection in image based on enhanced Gabor filtering // International Journal of Bio-Science and Bio-Technology. 2010. Т. 2, № 4. С. 39-50.
4. Гонда А. Р. Фрактальна будова електроосаджених у стохастичних режимах прошарків міді та її вплив на фазоутворення в реакціях з оловом / А. Р. Гонда, В. В. Морозович, Я. Д. Король, Ю. О. Ляшенко // Вісник Черкаського університету. Серія: «Фізико-математичні науки» –2019. No1. –С. 80-95. Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2019-1-80-95>

5. Морозович В. В. Застосування попередньої обробки зображень із растрового електронного мікроскопа для покращення ідентифікації структурних елементів / В. В. Морозович, А. Р. Гонда, Ю. О. Ляшенко // Вісник Черкаського університету. Серія «Прикладна математика. Інформатика». –2017. No 1-2. С. 15-24. Режим доступу: <http://eprints.cdu.edu.ua/id/eprint/4373>
6. Bellakhdhar, F., Loukil, K., Abid, M. Face recognition approach using Gabor Wavelets, PCA and SVM // International Journal of Computer Science Issues (IJCSI). 2013. T. 10, № 2. С. 201.
7. Qin, S., et al. Facial expression recognition based on Gabor wavelet transform and 2-channel CNN // International Journal of Wavelets, Multiresolution and Information Processing. 2020. T. 18, № 02. С. 2050003.

6. References:

1. LEE, Tai Sing. Image representation using 2D Gabor wavelets. IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence, 1996, 18.10: 959-971.
2. Mehrotra, R., Namuduri, K. R., & Ranganathan, N. (1992). Gabor filter-based edge detection. Pattern recognition, 25(12), 1479-1494.
3. Dolezel, M., Hejtmankova, D., Busch, C., & Drahansky, M. (2010). Segmentation procedure for fingerprint area detection in image based on enhanced Gabor filtering. International Journal of Bio-Science and Bio-Technology, 2(4), 39-50.
4. Honda, A. R., Morozovych, V. V., KorolYa.K., LyashenkoYu.O. (2019). Fractal structure of electrodeposited copper in stochastic regimes and its effect on phase formation in tin reactions. Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriiia «Fizyko-Matematychni Nauky»(Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics"), (1), 80-95. Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2019-1-80-95>
5. Morozovych, V. V., Honda, A. R., Lyashenko, Y. O. (2017) Application of raster electron microscope image pre-processing to improve the identification of structural elements. Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriiia «Prykladna matematyka. Informatyka» (Bulletin of Cherkasy University. Series " Applied Mathematics. Computer Science ") (1-2). pp. 15-24. Retrieved from <http://eprints.cdu.edu.ua/id/eprint/4373>
6. Bellakhdhar, Faten, Kais Loukil, and Mohamed Abid. "Face recognition approach using Gabor Wavelets, PCA and SVM." International Journal of Computer Science Issues (IJCSI) 10.2 (2013): 201.
7. Qin, Shu, et al. "Facial expression recognition based on Gabor wavelet transform and 2-channel CNN." International Journal of Wavelets, Multiresolution and Information Processing 18.02 (2020): 2050003.

A. R. Honda

PhD-student,

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

andriy.gonda@vu.cdu.edu.ua

Yu. O. Lyashenko

Doctor of physical and mathematical sciences, professor,

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

lyashenko.yurij@gmail.com

RESEARCH OF THE MORPHOLOGY OF THE CONTACT ZONE OF COPPER WELDED CONTACTS USING IMAGES SEGMENTATION OF STRUCTURAL ELEMENTS BASED ON WAVELET TRANSFORM

The article focuses on the analysis of the morphology of the contact zone of copper junctions using image texture segmentation algorithms and the OpenCV library.

The article discusses the main approaches to the selection of interphase boundaries using the OpenCV graphics library and the use of the Gabor filter to select pore contours, detect defects and pores on interfaces, and establish contact zone phase ratios. The image processing procedure, based on Gabor filtering, was developed and tested. The phase areas at the interfaces of the diffusion zones of the Cu-Sn system were calculated for the samples obtained for different modes of copper electrodeposition: stationary, pulse-reverse, and stochastic.

The phase area analysis procedure has been improved. Attempts have been made to apply the texture segmentation procedure to images in which the amplitude of the intensity of gray gradations is proportional to the amplitude of the noise of gray gradations.

An attempt was made to texture the elements of the lamellar structure in the alloy from images of raster electron microscopy.

It was shown that the texture segmentation algorithm, which uses the Gabor wavelet filter, allows the separation of image elements representing defective areas and diffusion contact unnecessary areas. It was shown that texture segmentation algorithm allows the identification of areas where slight changes in the color intensity gradient (gradations of gray) are possible. It was shown that usage of bilateral filtering, or Gaussian blur in combination with the Gabor wavelet filter, allows a clearer picture of image boundaries where there is a gradient of gray gradations for low-quality images (images that contain significant color differences in the noise presence).

Keywords: wavelet-transform, copper, tin, scanning electron microscopy, image processing algorithms, OpenCV, powder metallurgy.

Одержано редакцією 20.08.2022

Прийнято до друку 27.08.2022

ORCID: 0000-0002-2594-5559

A. M. Gusak

Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, 81 Shevchenko Blvd., UA-18031
Cherkasy, Ukraine

Ensemble3 Centre of Excellence, Wolczynska Str. 133, 01-919 Warsaw, Poland
amgusak@ukr.net

ORCID: 0000-0002-8951-2058

A. Titova

Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, 81 Shevchenko Blvd., UA-18031
Cherkasy, Ukraine

Ensemble3 Centre of Excellence, Wolczynska Str. 133, 01-919 Warsaw, Poland
titova.anastasiya@vu.cdu.edu.ua

DOI: 10.31651/2076-5851-2022-33-46

PACS: 68.35.Fx, 81.40.Lm

NEW THERMODYNAMIC APPROACHES TO FAILURE ANALYSIS IN MICROELECTRONIC MATERIALS

Failure of the microelectronic device may be treated in the frame of non-equilibrium thermodynamics applied to open systems under the condition of incompatibility of steady states for different processes. The criterion of failure can be related to some threshold amount of the structural entropy produced and accumulated in the system by the external forces. This hypothesis provides a simple interpretation of the empirical Black equation for the mean time to failure in the case of electromigration, and helps to predict similar equations for the cases of thermo- and stress migration. The failure itself can be treated as a phase/structure transformation in the open system and described by kinetics similar to Kolmogorov-Avrami kinetics of the first-order phase transformations.

Keywords: entropy production, vacancies, voids, failure, open system, flux, diffusion.

1. Introduction.

Failure of any concrete microelectronic device is a stochastic event and, as a rule, cannot be predicted deterministically, but the mean time to failure and even distribution of times to failure can be predicted with good accuracy. Actually, this is the main task of reliability theory [1-4]. This paper will be about some fundamental, even philosophical aspects of reliability. The key issues and questions of our thermodynamic approach to failure are:

1. Interconnect or solder joint is an open system under the heterogeneous external (boundary) conditions producing the thermal and structural entropy
2. Failure is a result of incompatibility of steady-state for different non-equilibrium processes.
3. Failure is a result of the accumulation of some threshold structural entropy
4. Failure is a kind of phase transition, including nucleation, growth, and ripening, but all this in open heterogeneous systems.
5. All living creatures are mortal. All microelectronic devices are also, most probably, mortal. Is it possible to make an immortal interconnect?

Let us remind shortly some fundamentals of thermodynamics of the closed and open systems. Our definitions of closed and open systems are similar to but not coinciding with traditional descriptions. This is summarized in Table 1.

If a system is isolated and in a non-equilibrium state, it may have various evolution paths to equilibrium (Fig. 1). What is the criteria of choice among these paths - is not known for sure, but many people believe that the most probable evolution path corresponds to the maximal entropy production rate among all possible paths. The final state of an isolated system (if one forgets about fluctuations) corresponds to maximum entropy and it is a second law of thermodynamics.

If a system is surrounded by (and in good thermal contact with) a thermal bath with uniform fixed temperature and fixed volume, it may have also various evolution paths to equilibrium. What is the criteria of choice among these paths - is also not known for sure, but many people believe that the most probable evolution path corresponds to the maximal rate ($-\frac{dF}{dt}$) of the Helmholtz free energy $F=U-TS$ decrease among all possible paths. The final state of the system in thermal bath and with constant volume corresponds to minimum Helmholtz free energy. It is a well-proved consequence of the second law of thermodynamics.

If, instead of volume, the pressure is fixed (which is typical for condensed phases), the final state is characterized by the minimum of Gibbs free energy $G=U-TS+pV$, and many people believe that the choice of evolution path corresponds to the maximum release rate of Gibbs free energy, ($-\frac{dG}{dt}$).

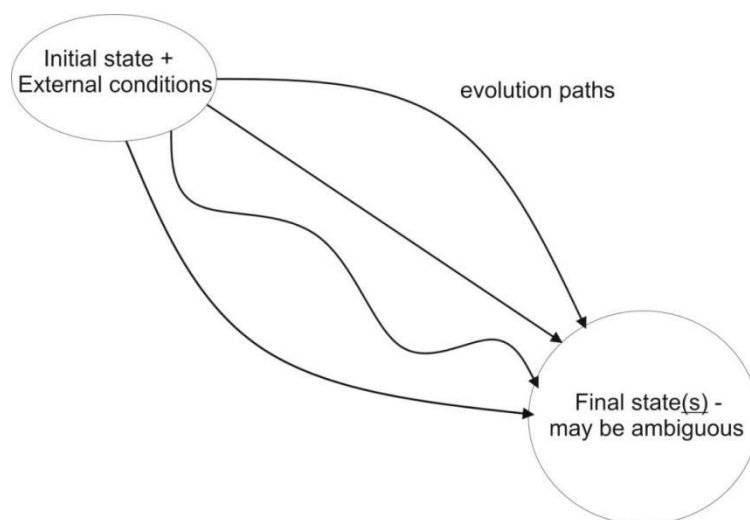


Fig. 1. Illustration of multiple evolution paths.

Рис. 1. Ілюстрація неоднозначності шляхів еволюції

Table 1
Таблиця 1

Evolution paths and final state of the closed and open systems

Шляхи еволюції та кінцевий стан закритих і відкритих систем

Initial state + External conditions		Choice of evolution path and level of understanding	Final state and level of understanding
Closed system	Isolated	Maybe, $\frac{dS}{dt} = \max$, but it is not proved	$S \rightarrow \max$ -second law of thermodynamics

	In homogeneous thermal bath, $T=\text{const}$, $V=\text{const}$	Maybe ($-\frac{dF}{dt} = \max$) or maybe transformation velocity $=\max$ or...?	$F=U-TS \rightarrow \min$ checked and proved
	In the homogeneous thermal bath, $T=\text{const}$, $p=\text{const}$	Maybe ($-\frac{dG}{dt} = \max$) or maybe transformation velocity $=\max$ or...?	$G=U-TS+pV \rightarrow \min$ checked and proved
Open system	Under gradient of electric potential with constant conductivity	Not very well studied but taking a small time interval	Steady-state, characterized by a minimum of entropy production, $\frac{dS_{total}}{dt} = \min$
	Under gradient of temperature with constant heat conductivity	Temperature redistribution according to heat diffusion parabolic equation	Steady-state, characterized by a minimum of entropy production, $\frac{dS_{total}}{dt} = \min$
	Under gradient of electric potential inducing the electron wind effect	Electron wind effect induces electro-migration, and corresponding redistribution of atoms, vacancies. Also, electro-migration induces stresses and corresponding stress migration. Also, current induces nonuniform Joule heating and corresponding temperature gradients which induce the thermomigration.	Failure - formally, also “steady-state” effect but with effective conductivity tending to zero, $j_{el} = 0$

2. Evolution of open systems

2.1. Open system - one parameter - one steady-state process is approached

Now we come to an open system. We will treat as an open system any system, which finds itself in the heterogeneous or/and time-dependent external (boundary) conditions which means global gradients of temperature or electric potential, chemical potential, or any flux over the system. In this sense, maybe it would be better to call such a system “driven” as Georges Martin from Nuclear Centre Saclay in France used to call it. Yet, we will keep the more general term “open system”.

For us, the system is open if its boundary conditions are incompatible with reaching the equilibrium. If we keep the different electric potentials in different points of the conducting

system, the equilibrium is not possible because the current will always pass between boundaries with different potentials, unless the effective conductivity will decrease to zero due to a large void or crack (and it means failure) (Fig. 2). **Instead of equilibrium, the system may reach the steady state:** non-zero fluxes but zero time derivatives. Simple mathematics shows that, if conductivity is constant, then the steady state corresponds to the globally minimal entropy production among all possible distributions of electric potential and current, compatible with boundary conditions for potential.

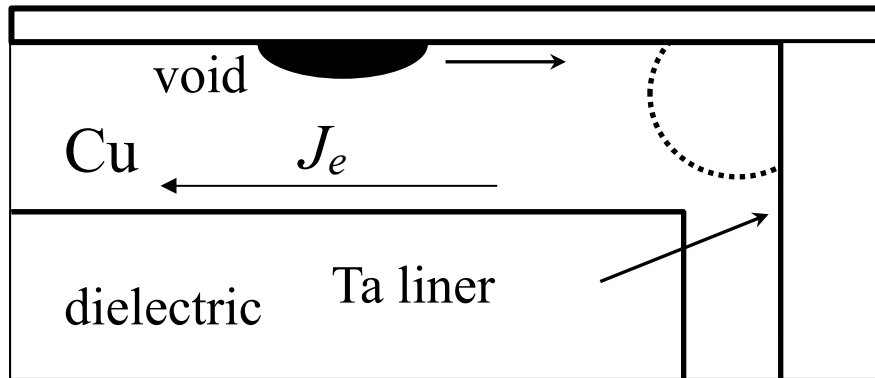


Fig. 2. Failure mechanism - migration of void under electron wind along the interface metal/dielectric towards via

Рис. 2. Механізм відмови - міграція пори до перехідного з'єднання під дією електронного вітру вздовж інтерфейсу метал/діелектрик

2.2. Entropy production minimization for steady-state current

The density of entropy production by current, multiplied by temperature, is just a product of current and minus gradient of electric potential and is equal to Joule heating density. When approaching the steady state, entropy production tends to a minimum. Indeed, entropy production density times temperature is a sum of products of flux densities and the driving forces generating these fluxes. In our case, the flux density is the current density, and force is a minus gradient of electric potential. Flux and force are related by conductivity λ . In a steady state, the integral of this product over all volume of conductor should tend to minimum. Mathematically, call such integrals the functionals of potential and current distribution.

$$T \frac{dS}{dt} = \iiint \vec{j}_{el}(-\vec{\nabla}\varphi) dV = \iiint \lambda(\vec{\nabla}\varphi)^2 dV = \min \quad (1)$$

Putting variation of this functional (under fixed constant conductivity λ) and equalizing it to zero at the arbitrary variation of electric potential immediately leads us (by the standard procedure of variational analysis) to the Laplace equation for electric potential:

$$\text{div}(\text{grad } \varphi) = 0 \quad (2)$$

This distribution of potential and current may exist unchanged forever if the conductivity will be constant. BUT! Conductivity, in the long term, is not constant because it depends on morphology (including changing cross-section of interconnect due to voids and cracks), morphology changes due to migration of atoms, and especially due to migration, accumulation, and generation of vacancies.

3. Structural entropy production during diffusion, vacancy generation, and annihilation.

Now we will concentrate on the entropy production as a **reason**, or at least, as a **marker** of failure.

Failure is, typically, a result of an accumulation of some threshold level of structural defects in one place. On the other hand, the evolution of an open system is described by the entropy production in local relaxation processes. This entropy production, in general, contains thermal and structural parts. The thermal part of entropy production (in our case, Joule heating) usually just dissipates in the ambient and is not accumulated, but the structural part may accumulate in the form of extra defects. Thus, failure may be treated as the result of reaching the threshold of the structural part of entropy production. Let us consider some obvious examples of the structural part of entropy production.

3.1. Diffusional redistribution of tracer atoms in chemically homogeneous pure material or chemically homogeneous alloy.

If the concentration gradient $\text{grad}(C^*)$ of the tracer concentration and corresponding driving force - the minus gradient of chemical potential, $-\frac{k_b T}{C^*} \cdot \text{grad}(C^*)$, then the entropy production density (times temperature) will be the product of flux density $-D \cdot \text{grad}(C^*)$ and the driving force and of course, will be positive. Yet, redistribution of tracer atoms (isotopes of the main matrix components) does not change any energy or enthalpy - thus, this entropy production does not produce any heat - it changes only configurational entropy (increasing it). So, the self-diffusion of isotopes produces only structural entropy.

3.2. Structural entropy production by vacancy diffusion.

In the solid material with vacancies but with vacancy sinks and sources only at the external boundaries, the following conservation law is valid inside the material:

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = -\text{div}(\Omega \vec{J}_v) . \quad (3)$$

($\vec{J}_v$ is a local vacancy flux density, Ω is the mean volume per site which we approximately take as equal to vacancy volume).

Configurational entropy of vacancy distribution within the material is

$$S_v = -k_b \iiint (C_v \ln C_v + (1 - C_v) \ln(1 - C_v)) \frac{dV}{\Omega} . \quad (4)$$

The chemical potential of vacancies is equal to zero for the case of vacancies in equilibrium and is determined by vacancy super- or undersaturation:

$$\mu_v = k_b T \ln \frac{C_v}{C_v^{eq}} , \quad (5)$$

so that

$$\ln C_v = \frac{\mu_v}{k_b T} + \ln C_v^{eq} . \quad (6)$$

Here C_v^{eq} is an equilibrium vacancy concentration. After some elementary algebra, one gets from Eqs. (3-6) and taking into account that $C_v \ll 1$:

$$\begin{aligned} \frac{dS_v}{dt} &= \frac{-k_b}{\Omega} \iiint \frac{\partial C_v}{\partial t} (\ln C_v - \ln(1 - C_v)) dV = \\ &= \frac{-k_b}{\Omega} \iiint (-\text{div}(\Omega \vec{J}_v)) \left(\frac{\mu_v}{k_b T} + \ln C_v^{eq} \right) dV \end{aligned} \quad (7)$$

The equilibrium vacancy concentration is determined by the vacancy formation enthalpy H_{1v} :

$$C_v^{eq} = \exp\left(-\frac{H_{1v}}{k_b T}\right) \quad (8)$$

At that, $H_{1v} = TS_{1v}$, here S_{1v} is an entropy increase due to adding one vacancy to the system.

Our result is:

$$T \frac{dS_v}{dt} = \oint (\mu_v - H_{1v}) \vec{J}_v d\vec{\Sigma} + \iiint \vec{J}_v (-\vec{\nabla} \mu_v) dV \quad (9)$$

Here, the first term is an entropy production due to vacancy diffusion, and it is purely structural, not related to any heat generation or absorption:

$$\vec{J}_v(-\vec{\nabla}\mu_v) = \frac{D_v}{k_b T C_v} (\vec{\nabla}C_v)(\vec{\nabla}C_v) \quad (10)$$

3.3. Structural entropy production by vacancies with an account of vacancy sinks/sources in relaxation approximation.

Now we consider the more realistic case of entropy production by vacancies in the real crystal with vacancy sinks and sources. Here we consider the simplest relaxation approximation when these sinks/sources are “smashed” over all crystal continuously and characterized by the single parameter – relaxation time. Mathematically it is a second term in the right-hand side of the kinetic equation (11) for vacancy concentration.

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = -div(\Omega \vec{J}_v) - \frac{C_v - C_v^{eq}}{\tau_v} \quad (11)$$

The first term is a minus divergence of vacancy flux, and the second describes going extra vacancies to sinks if the vacancy concentration is higher than the equilibrium value, and the generation of lacking vacancies by sources if the vacancy concentration is lower than the equilibrium one. Here τ_v - vacancy relaxation time determined by the mean free path for vacancy migration from sinks to sources and by vacancy diffusivity.

If supersaturation or undersaturation by vacancies is relatively small, the difference of actual and equilibrium vacancy concentration is easily transformed into the chemical potential of non-equilibrium vacancies.

$$C_v - C_v^{eq} = C_v^{eq} \left(\frac{C_v}{C_v^{eq}} - 1 \right) \approx C_v^{eq} \exp\left(\frac{C_v}{C_v^{eq}}\right) = C_v^{eq} \frac{\mu_v}{k_b T} \quad (12)$$

In such terms, the relaxation rate is proportional to the difference of actual vacancy chemical potential and equilibrium vacancy potential (which is, of course, zero).

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} \cong -div(\Omega \vec{J}_v) - \frac{C_v^{eq}}{k_b T} \frac{\mu_v}{\tau_v} \quad (13)$$

Again we write down and transform the expressions for vacancy configurational entropy and the rate of its change:

$$S_v = -k_b \iiint (C_v \ln C_v + (1 - C_v) \ln(1 - C_v)) \frac{dV}{\Omega} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{dS_v}{dt} &= \frac{-k_b}{\Omega} \iiint \frac{\partial C_v}{\partial t} (\ln C_v - \ln(1 - C_v)) dV = \\ &= \frac{-k_b}{\Omega} \iiint \left(-div(\Omega \vec{J}_v) - \frac{C_v^{eq}}{k_b T} \frac{\mu_v}{\tau_v} \right) \left(\frac{\mu_v}{k_b T} + \ln C_v^{eq} \right) dV = \\ &= \iiint \frac{\mu_v - H_{1v}}{T} div(\vec{J}_v) dV + \frac{1}{T\Omega} \iiint \frac{C_v^{eq}}{k_b T} \frac{(\mu_v)^2}{\tau_v} dV + \frac{k_b C_v^{eq} \ln C_v^{eq}}{\Omega k_b T \tau_v} \iiint \mu_v dV \end{aligned} \quad (15)$$

$$\iiint (\mu_v - H_{1v}) div(\vec{J}_v) dV = \iiint div((\mu_v - H_{1v}) \vec{J}_v) dV - \iiint \vec{J}_v \vec{\nabla} \mu_v dV \quad (16)$$

Here,

$\iiint \vec{J}_v (-\vec{\nabla} \mu_v)$ - entropy production by vacancy migration

$\oint (\mu_v - H_{1v}) \vec{J}_v d\vec{S} = \frac{dS^{ext}}{dt}$ - out-flux of entropy (if any)

Due to the out-flux of vacancies to the external boundaries which act as a vacancy sink, one gets:

$$\iiint \frac{C_v^{eq}}{k_b T} \frac{\mu_v}{\tau_v} dV \cong \iiint \frac{C_v - C_v^{eq}}{\tau_v} dV = \frac{\iiint C_v dV - C_v^{eq} \iiint dV}{\tau_v} = \frac{\Omega N_v - \Omega N_v^{eq}}{\tau_v} = \Omega \frac{\Delta N_v}{\tau_v} \quad (17)$$

On the other hand,

$$\frac{dV^{tot}}{dt} = \Omega \frac{dN_v^{tot}}{dt} \quad (18)$$

(total shrinking rate = $\frac{dV^{tot}}{dt} < 0$)

Finally, our result is:

$$T \frac{dS_v}{dt} = \oint (\mu_v - H_{1v}) \vec{J}_v d\vec{S} + H_{1v} \left(-\frac{N_v - N_v^{eq}}{\tau_v} \right) + \iiint \vec{J}_v (-\vec{\nabla} \mu_v) dV + \iiint \frac{C_v^{eq}}{k_b T} \frac{(\mu_v)^2}{\tau_v} \frac{dV}{\Omega} \quad (19)$$

Here, the first term is an entropy change due to the out-flux of vacancies.

The second term is a global entropy change due to the creation or annihilation of vacancies at the sinks/sources.

The third term is entropy production due to vacancy diffusion.

The fourth term is an entropy production due to the relaxation of non-equilibrium vacancy concentration.

4. Structural entropy production as a reason for failure

4.1. *What is the fraction of structural entropy in the total entropy production by diffusion, electromigration, thermomigration, and stress migration?*

If the driving force of vacancy flux is purely configurational, the produced entropy is purely structural. What is the form (thermal or configurational or both) of the produced entropy, if the driving force is an electron wind in electromigration or temperature gradient thermomigration or stress gradient in stress migration, is not very clear so far.

Let us consider electromigration. The elementary act of electromigration – atomic jump (and opposite vacancy jump) under electron wind force, of course, proceeds with heat generation during electron scattering on the jumping atom and its deformed vicinity. Yet, at least a significant part of this heat generation is actually a Joule heating already taken into account in entropy production by electron current under a gradient of electric potential.

Let us assume that the structural entropy production by electromigration is a constant fraction f of total entropy production by the electromigration, ($0 < f < 1$)

$$T \frac{dS_{struct}}{dt} = f \cdot J \cdot X = f \cdot \left(\frac{f \cdot C \cdot D}{k_b T} \cdot Z_e \rho_{jel} \right) \cdot Z_e \rho_{jel} \quad (20)$$

Now we will try to apply this assumption for the explanation and prediction of parameters in the Black equation for MTTF.

Our task is to understand the Black equation for MTTF and to provide receipts for the prediction of its parameters n , E_a , A .

$$MTTF = A(j^{-n}) \exp\left(\frac{E_a}{k_b T}\right) \quad (21)$$

4.2. Treating MTTF as a time to accumulate the threshold structural entropy

Now, we consider entropy production during electromigration. We treat MTTF as a time to accumulate some threshold entropy, S threshold. At that, we take into account the entropy produced by electron flow (Joule heating) is evacuated by the heat out-flux. Thus, we may assume that the accumulation of entropy proceeds via electromigration of atoms. We exclude entropy production by Joule heating, from the entropy balance. So far, let us exclude also thermomigration and stress-migration. The total entropy production until failure is

$$J \cdot X \cdot MTTF = \frac{TS_{threshold}}{V} \quad (22)$$

$$\frac{f \cdot C \cdot D}{k_b T} \cdot (Z_e \rho_{jel})^2 \cdot MTTF = \frac{TS_{threshold}}{V} \quad (23)$$

$$t_{failure} = \frac{TS_{threshold}}{V J_e X_e} = A' \frac{1}{j^2} \frac{1}{D} = A j^{-2} \exp\left(\frac{E_a}{k_b T}\right) \quad (24)$$

4.3 Threshold structural entropy

It is important to suggest some receipt for predicting the threshold entropy corresponding to failure. In general, it is a very complicated problem since failure has various mechanisms

(modes). In this paper, we limit ourselves to the case of voiding (pore formation) at the cathode end, as an immediate mechanism of failure.

To nucleate and grow the viable void, the cathode end should accumulate the nonequilibrium vacancies. If the supersaturation by vacancies is not large, then the accumulation of N_v extra vacancies increases entropy by $\frac{N_v E_v}{T}$. Indeed, the equilibrium of the vacancy subsystem means zero derivative of Gibbs free energy:

$$\frac{d}{dN_v} (N_v H_v - TS(N_v)) = 0 = H_v - T \frac{dS}{dN_v} \Rightarrow \frac{dS}{dN_v} = \frac{H_v}{T} \quad (25)$$

It immediately gives that the increase of entropy by adding one extra vacancy to the system is just a vacancy formation enthalpy divided by temperature.

4.4. Vacancies as the “quants” of entropy and carriers of entropy

Thus, adding one vacancy to the almost equilibrium system means adding additional entropy equal to the enthalpy of vacancy formation divided by temperature. In usual conditions of small pressures (typically less than gigapascal) the vacancy formation enthalpy is close to vacancy formation energy, so that

$$\Delta S \approx \Delta N_v^{\text{extra}} \frac{E_v}{T} \quad (26)$$

Sooner or later these extra vacancies will unite into the void or crack stopping the current. To stop the current completely, the void should have cross-section A of the interconnect and at least $\delta \approx 0,2$ nm of thickness:

Then the threshold entropy may be VERY ROUGHLY approximated as

$$S^{\text{threshold}} \approx \frac{A \cdot \delta}{\Omega} \frac{E_v}{T} \quad (27)$$

4.5. Competition of K (Kirkendall) - and F (Frenkel) - vacancy sinks

Relaxation of the vacancy subsystem can proceed in two ways:

1) The first way is voiding as a result of vacancy relaxation at the so-called F-sinks (Frenkel sinks - the terminology of Ya. E. Geguzin), which means just joining vacancies into voids.

2) The second way is vacancy relaxation without voiding, at the so-called K-sinks, (Kirkendall sinks, according to the same terminology of Ya. E. Geguzin, localized at dislocation kinks or the surface of crystal grains).

This classification appeared due to an investigation of interdiffusion. Since 1947, thanks to Ernst Kirkendall, we know that the inequality between the diffusivities of components in binary diffusion couple leads to compensating vacancy flux from the slow component side to the fast component side, and divergency of this vacancy flux leads simultaneously to two effects – Kirkendall shift and Frenkel or Kirkendall voiding. The Kirkendall shift is a movement of inert markers, embedded in the crystal lattice, shifted due to dislocation climb generated by vacancy annihilation at one side of diffusion couple and vacancy generation at another side. Frenkel or Kirkendall voiding is just uniting extra vacancies into voids.

The difference between K-sinks and F-sinks of vacancies in the case of interdiffusion generating the vacancy flux from the side of slow component B to the side of fast component A. Vacancies coming to the A-side have two possibilities – (1) to annihilate at the dislocation generating its climb and causing the lattice shift? And (2) to join the void and increase it, instead of causing lattice shift. In the case of electromigration, the vacancies migrate from anode to cathode due to electron wind onto the atoms. If there are no preexisting voids, then they can be created only at the K-sources at the anode end, but they have two possibilities at the cathode end. Therefore, the total amount of “emptiness” in the interconnect increases (Fig. 3).

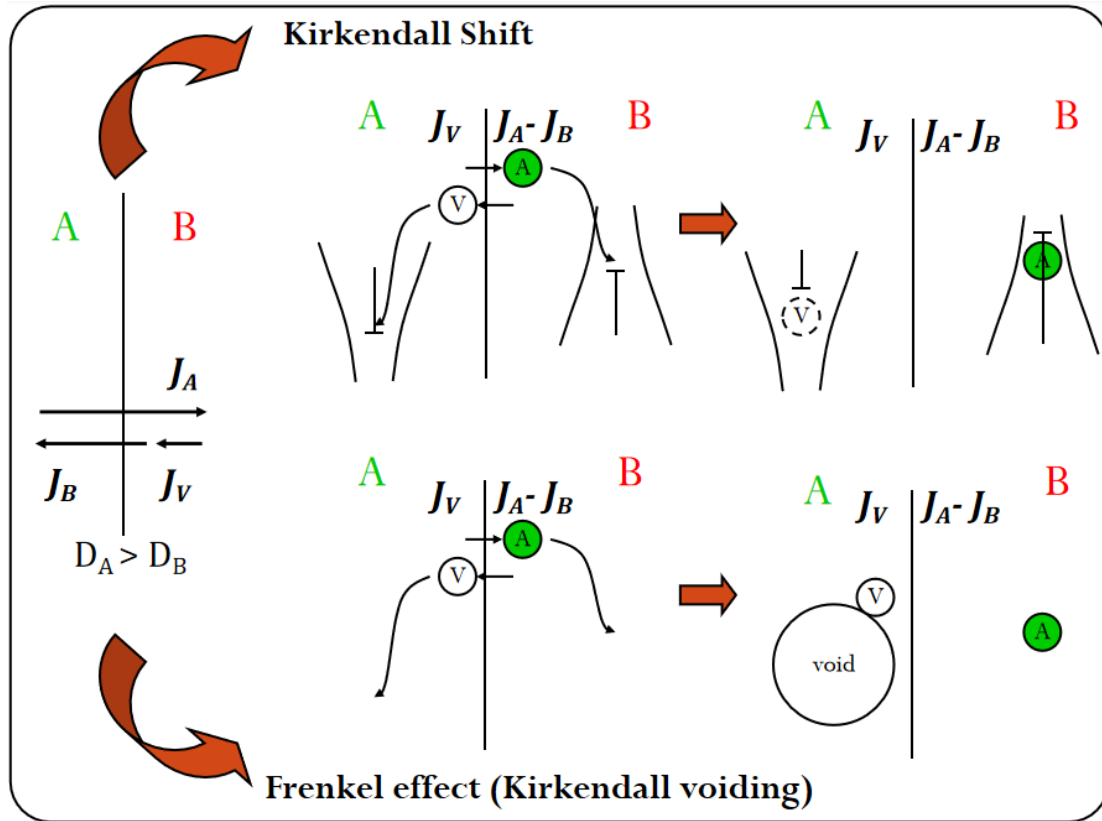


Fig. 3. Mechanisms of Kirkendall and Frenkel effects (Drawing for description of competition between the Kirkendall shift and Kirkendall voiding was made by Dr. T. Zaporozhets)

Рис. 3. Механізми ефектів Кіркендалла та Френкеля (Малюнок для опису конкуренції між зсувом Кіркендалла та утворенням пор виконано доктором Т. Запорожець)

Vacancies lead to failure if they go to F-sinks, and they annihilate without causing damage if they go to K-sinks. Thus, one should help K-sinks in their competition with F-sinks.

For this, we may try to increase the dislocation density. Yet, it will increase the resistivity, which is not good. Professor Chih Chen et al. discovered about 10 years ago that nanotwinned copper may be a good candidate. Nanotwinned copper can absorb vacancies without forming voids and has a resistivity almost the same as “ideal” copper without defects.

4.6. MTTF for thermomigration. Prediction of MTTF for thermomigration-caused failure

Similar to electromigration, the major entropy production in thermomigration is due to heat propagation under a temperature gradient:

$$\frac{Tds}{vdt} = (-\kappa \frac{dT}{dx}) (-\frac{1}{T} \frac{dT}{dx}) \quad (28)$$

In thermomigration of atoms, we have, very roughly

$$\frac{Tds}{vdt} = (C \frac{D}{k_b T} X_h) X_h = C \frac{D}{k_b T} (3k_b \frac{dT}{dx})^2 \quad (29)$$

$$f \cdot J_h X_h t^{\text{failure}} = \frac{TS_{\text{threshold}}}{v} \quad (30)$$

$$\text{MTTF} \approx t^{\text{failure}} = \frac{TS_{\text{threshold}}}{v J_h X_h} = B \left(-\frac{dT}{dx} \right)^{-2} \exp \left(\frac{E_a}{k_b T} \right) \quad (31)$$

$$J_h = C \frac{D}{k_b T} \frac{Q^*}{T} \left(-\frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (32)$$

$$X_h = \frac{Q^*}{T} \left(-\frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (33)$$

So, we predict that the MTTF for thermomigration is inversely proportional to the squared temperature gradient.

4.7. MTTF for stress-migration

We can practically repeat the same time of derivation of MTTF for the case of stress migration. In this case, the driving force is the gradient of the stress tensor, $\text{grad}(\sigma\Omega)$.

$$X_s = \frac{d\sigma\Omega}{dx} \quad (34)$$

$$J_s = CMF = C \frac{D}{k_b T} \left(\frac{d\sigma\Omega}{dx} \right) = \frac{D}{k_b T} \frac{d\sigma}{dx} \quad (35)$$

$$f \cdot J_s X_s t^{\text{failure}} = \frac{TS_{\text{threshold}}}{V} \quad (36)$$

$$\text{MTTF} \approx t^{\text{failure}} = \frac{TS_{\text{threshold}}}{V J_s X_s} = G \left(-\frac{d\sigma}{dx} \right)^{-2} \exp \left(\frac{E_a}{k_b T} \right) \quad (37)$$

So, we predict that the MTTF for stress migration is inversely proportional to the squared stress gradient.

5. Failure as a phase/structure transformation in open system

One of the basic equations in the general kinetic theory of the first-order phase transformations is the Kolmogorov-Avrami equation for the time dependence of the transformed fraction of the parent phase

$$Y = 1 - \exp[-K \cdot t^n] \quad (38)$$

where K includes nucleation frequency and growth velocity of the new phase precipitates. The kinetics of K-A evolution is a typical S-curve (Fig. 4a), which gives, in a double-logarithmic scale, the linear dependence (Fig. 4b)

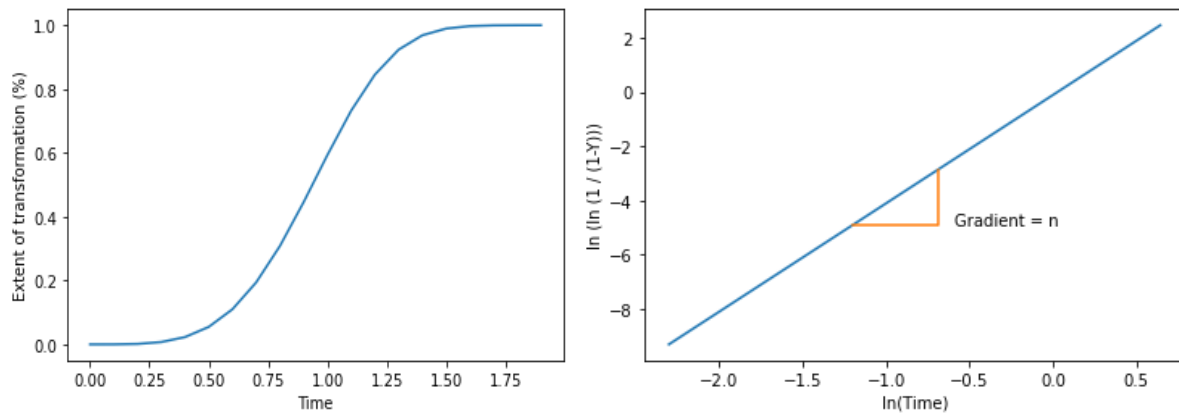


Fig.4. Kolmogorov-Avrami evolution: S-type dependence of transformed volume fraction vs time (a) and the same dependence in double-logarithmic scale (b).

Рис. 4. Еволюція Колмогорова-Аврамі: S-подібна залежність частки перетвореного об'єму від часу (а) і та ж залежність в подвійному логарифмічному масштабі (б).

On the other hand, the times to failure dispersion is often described by Weibull distribution, which in cumulative form (Cumulative function -fraction of failed devices by time t) practically coincides with the Kolmogorov-Avrami equation (Fig. 5):

$$F(x) = 1 - e^{-(x/\lambda)^k}$$

$$-\ln(1 - F(x)) = (x/\lambda)^k$$

$$\ln(-\ln(1 - F(x))) = k \ln x - k \ln \lambda \quad (39)$$

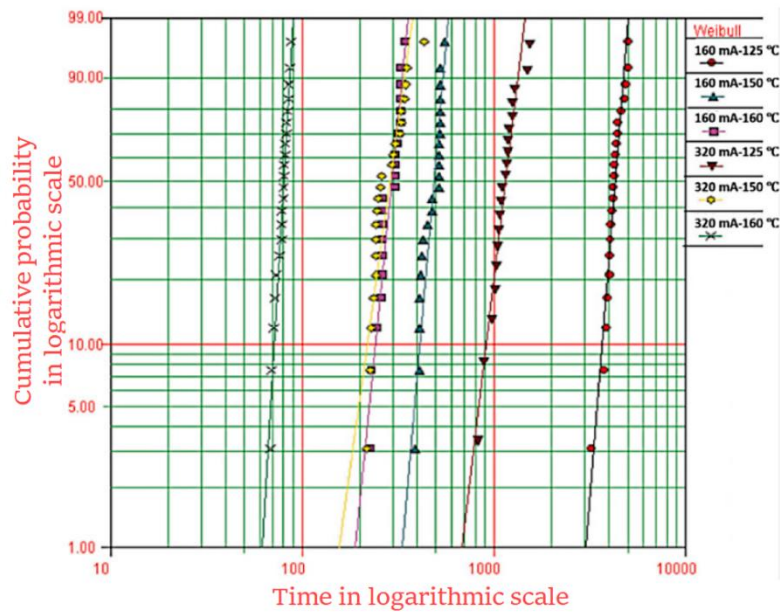


Fig. 5. Typical Weibull plot (data taken from our recent paper[4])

Рис. 5. Типовий графік Вейбулла (дані взяті з нещодавньої статті авторів [4])

Failure, like phase transformation, usually starts its pre-history by some (1) "nucleation event" - for example, nucleation of nanovoid somewhere at the triple joint of grain boundaries or the interface metal/dielectric, (2) "growth process" (for example, migration of nanovoid to the cathode end, or/and merging or just growth of the voids at the cathode end).

At that, we should be ready to consider the "growth" process of future failure in the multidimensional space depending on the nature of evolution from nucleating defects to the abrupt change of resistivity (depending on mechanism).

6. Conclusions

1. Failure may be treated as a result of the accumulation of structural entropy beyond some threshold value. Accumulation of structural entropy is calculated as a "non-heating" part of entropy production in the processes of electromigration, thermomigration, and stress migration. Such an approach leads to Black's equation for MTTF with exponent $n = 2$ for electromigration-induced failure, and to analogous predictions for thermomigration-induced failure, as well as for stress migration-induced failure.

2. Failure may be treated as a result of the incompatibility of steady-states for different processes in an open system. For example, steady-state current under fixed voltage between the cathode and anode ends of interconnect leads to electromigration of atoms and vacancies which, in realistic materials, lead to non-steady-state voiding and hillock formation, and eventual failure. Fully compatible steady-states for all processes would mean "immortality" at least for interconnect.

3. Failure may be treated as a kind of first-order phase transformation in an open system and includes nucleation, growth or migration, and (sometimes) ripening. Moreover, the usually used cumulative Weibull distribution for time to failure (TTF) looks very similar to the Kolmogorov-Avrami equation for crystallization kinetics describing nucleation and growth of the crystalline phase.

4. Some ideas of the present paper may be found in the following books and papers: [1-9].

Acknowledgements.

This article is based on the invited lecture presented in City University Hong Kong at the Forum of Advanced Matter and Materials in September 2022. ([HK Tech Forum | City University of Hong Kong](#)). Authors are grateful to prof. King Ning Tu for many years of fruitful cooperation in the field of materials for microelectronics.

This work was supported by the ENSEMBLE3 Project (MAB/2020/14) which is carried out within the International Research Agendas Programme (IRAP) of the Foundation for Polish Science co-financed by the European Union under the European Regional Development Fund and the Teaming Horizon 2020 programme [GA #857543] of the European Commission.

References (in language original):

1. Tu K.N. Electronic thin-film reliability / K. N. Tu. – Cambridge: Cambridge University Press, 2010. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511777691>
2. Tu K. N. A unified model of mean-time-to-failure for electromigration, thermomigration, and stress-migration based on entropy production [Electronic resource] / K. N. Tu, A. M. Gusak // Journal of Applied Physics. – 2019. – Vol. 126, no. 7. – P. 075109. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.5111159>
3. A new physical model for life time prediction of Pb-free solder joints in electromigration tests / Tian Tian [et al.] // 2012 IEEE 62nd Electronic Components and Technology Conference (ECTC), San Diego, CA, USA, 29 May – 1 June 2012. – [S. l.], 2012. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1109/ECTC.2012.6248915>.
4. Fast prediction of electromigration lifetime with modified mean-time-to-failure equation / Yingxia Liu [et al.] // Materials Letters. – 2022. – P. 132880. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2022.132880>
5. Svoboda R. Crystallization of glasses – When to use the Johnson-Mehl-Avrami kinetics? / Roman Svoboda // Journal of the European Ceramic Society. – 2021. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2021.08.026>
6. Electromigration limits of copper nano-interconnects / Houman Zahedmaesh [et al.] // 2021 IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS), Monterey, CA, USA, 21–25 March 2021. – [S. l.], 2021. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1109/IRPS46558.2021.9405091>
7. Three-dimensional simulation of void migration at the interface between thin metallic film and dielectric under electromigration / T. V. Zaporozhets [et al.] // Journal of Applied Physics. – 2005. – Vol. 98, no. 10. – P. 103508. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.2131204>
8. Diffusion-Controlled Solid State Reactions: In Alloys, Thin Films and Nanosystems / Andriy M. Gusak [et al.]. – [S. l.] : Wiley & Sons, Incorporated, John, 2011. – 498 p.
9. Gusak A. M. Ostwald ripening with non-equilibrium vacancies / A. M. Gusak, G. V. Lutsenko, K. N. Tu // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54, no. 3. – P. 785–791. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.09.035>

References:

1. Tu, K. N. (2010). Electronic thin-film reliability. Cambridge University Press. Retrieved from <https://doi.org/10.1017/CBO9780511777691>
2. Tu, K. N., & Gusak, A. M. (2019). A unified model of mean-time-to-failure for electromigration, thermomigration, and stress-migration based on entropy production. Journal of Applied Physics, 126(7), 075109. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.5111159>

3. Tian, T., Gusak, A. M., Liashenko, O. Y., Han, J. K., Choi, D., & Tu, K. N. (2012, May). A new physical model for life time prediction of Pb-free solder joints in electromigration tests. In 2012 IEEE 62nd Electronic Components and Technology Conference (pp. 741-746). IEEE. Retrieved from <https://doi.org/10.1109/ECTC.2012.6248915>
4. Liu, Y., Gusak, A., Jing, S., & Tu, K. N. (2022). Fast prediction of electromigration lifetime with modified mean-time-to-failure equation. Materials Letters, 325, 132880. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2022.132880>
5. Svoboda, R. (2021). Crystallization of glasses—When to use the Johnson-Mehl-Avrami kinetics?. Journal of the European Ceramic Society, 41(15), 7862-7867. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2021.08.026>
6. Zahedmaesh, H., Pedreira, O. V., Tokei, Z., & Croes, K. (2021, March). Electromigration limits of copper nano-interconnects. In 2021 IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS) (pp. 1-6). IEEE. Retrieved from <https://doi.org/10.1109/IRPS46558.2021.9405091>
7. Zaporozhets, T. V., Gusak, A. M., Tu, K. N., & Mhaisalkar, S. G. (2005). Three-dimensional simulation of void migration at the interface between thin metallic film and dielectric under electromigration. Journal of applied physics, 98(10), 103508. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.2131204>
8. Gusak, A. M., Zaporozhets, T. V., Lyashenko, Y. O., Kornienko, S. V., Pasichnyy, M. O., & Shirinyan, A. S. (2011). Diffusion-controlled solid state reactions: in alloys, thin films and nanosystems. John Wiley & Sons.
9. Gusak, A. M., Lutsenko, G. V., & Tu, K. N. (2006). Ostwald ripening with non-equilibrium vacancies. Acta materialia, 54(3), 785-791. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.09.035>

А.М. Гусак

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
18031, б-р Шевченка, 81, м. Черкаси, Україна
Ensemble3 Centre of Excellence, Wolczynska Str. 133, 01-919 м. Варшава, Польща
amgusak@ukr.net

А. Тітова

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
18031, б-р Шевченка, 81, м. Черкаси, Україна
Ensemble3 Centre of Excellence, Wolczynska Str. 133, 01-919 м. Варшава, Польща
titova.anastasiya@vu.cdu.edu.ua

НОВІ ТЕРМОДИНАМІЧНІ ПІДХОДИ ДО АНАЛІЗУ ВІДМОВ У МАТЕРІАЛАХ МІКРОЕЛЕКТРОНІКИ

Мета роботи: сформулювати базові ідеї термодинамічного підходу до проблеми надійності матеріалів мікроелектроніки.

Методика: елементи мікроелектронного приладу (у першу чергу металеві з'єднання та припойні контакти) розглядаються як відкриті термодинамічні системи у полях градієнтів електричного потенціалу, температури та напруг.

Результати: Відмову можна розглядати як результат накопичення структурної ентропії, що перевищує деяке порогове значення. Накопичення структурної ентропії розраховується як «нетермічна» частина виробництва ентропії в процесах електроміграції, термоміграції та міграції у градієнті напруг. Нетермічне виробництво ентропії пов'язане, в першу чергу, з народженням дефектів, зокрема вакансій. Вперше отримані вирази для виробництва ентропії у твердих тілах із стоками та джерелами вакансій. Такий підхід призводить до нової інтерпретації рівняння Блека для середнього часу до відмови з показником $n = 2$ для випадку відмови, спричиненої електроміграцією, і до аналогічних рівнянь для відмов, спричинених термоміграцією, а також міграцією в полі напруг.

Висновки:

1. Відмову можна розглядати як результат несумісності стаціонарних станів для різних процесів у відкритій системі. Наприклад, стаціонарний струм під фіксованою напругою між катодним і анодним кінцями з'єднання призводить до електроміграції атомів і вакансій, що в реалістичних матеріалах призводить до нестаціонарного утворення пустот і горбків, а також до остаточного виходу з ладу. Повністю сумісні стаціонарні стани для всіх процесів означали б «безсмертя» принаймні для з'єднання. Наприклад, час до відмови повинен прямувати до нескінченності, якщо струм проходить через метал, у якому забезпечується повне пригнічення ефекту Френкеля (пороутворення) ефектом Кіркендалла (зсувом кристалічної ґратки внаслідок переповзання крайових дислокацій).

2. Відмову можна розглядати як своєрідне фазове перетворення першого порядку у відкритій системі, яке включає зародження, ріст або міграцію та (іноді) коалесценцію пор або інших причин відмови. При цьому звичний кумулятивний розподіл Вейбулла для часу напрацювання (TTF) виглядає дуже схожим на рівняння Колмогорова-Аврамі для кінетики кристалізації, що описує зародження та ріст кристалічної фази.

Ключові слова: виробництво ентропії, вакансії, пори, відмова, відкрита система, потік, дифузія.

Одержано редакцією 01.12.2022

Прийнято до друку 11.12.2022

ORCID: 0000-0002-4950-394X

А. Р. Гонда

аспірант,

ЧНУ імені Б. Хмельницького, Черкаси, Україна

andriy.gonda@vu.cdu.edu.ua

ORCID: 0000-0002-2594-5559

А. М. Гусак

доктор ф.-м. наук, професор,

ЧНУ імені Б. Хмельницького, Черкаси, Україна

amgusak@ukr.net

DOI: 10.31651/2076-5851-2022-47-60

PACS 02.30.Jr, 02.70.-с, 05.70.Fh, 05.70.Ln

ДИФУЗІЙНІ «СЮРПРИЗИ» В МОДЕЛЯХ ВЗАЄМНОЇ ДИФУЗІЇ

В статті розглянуто оптимізований алгоритм розв'язання рівняння дифузії для випадку нескінченних дифузійних пар із застосуванням нерівномірної шкали по просторовій координаті. Описано модель реакційної дифузії в квазістаціонарному наближенні, її результати порівнюються з прямим чисельним розв'язком другого закону Фіка з кусочно-неперервною залежністю коефіцієнта взаємної дифузії від концентрації, у якій цей коефіцієнт приймається рівним нулю всюди за межами інтервалів гомогенності проміжних і крайніх фаз. Здійснено комп'ютерне моделювання фазоутворення та конкуренції фаз для випадку росту однієї проміжної фази, росту та конкуренції двох та трьох проміжних фаз, перевірено виконання параболічного закону росту для фаз. Оптимізовано модель для дослідження руху інертних маркерів в околі початкового інтерфейсу дифузійної пари інтерфейсу та досліджено можливу біфуркацію та можливу нестійкість площини Кіркендала. При цьому стабільні К-площини є атракторами маркерів.

Ключові слова: взаємна дифузія, реакційна дифузія, конкуренція фаз, ефект Кіркендала, інертні маркери, чисельні методи у фізиці.

1. Вступ

Для аналізу процесів взаємної та реакційної дифузії у твердих фазах, основним є метод дифузійних пар. Серед фундаментальних феноменологічних моделей дифузії можна виділити моделі реакційної дифузії в бінарній системі з утворенням проміжних впорядкованих фаз із ненульовими інтервалами гомогенності, а також взаємної дифузії з різкою концентраційною залежністю парціальних коефіцієнтів дифузії та пов'язаного з їх різницею ефекту Кіркендала.

Мета статті є в першу чергу методичною: продемонструвати можливості нових феноменологічних підходів до моделювання традиційних задач взаємної та реакційної дифузії.

В загальному випадку задача про взаємну дифузію з одночасним утворенням і ростом кількох проміжних фазових прошарків є складною навіть при дифузійному контролі процесу (коли атоми не затрачають помітного часу для перетину міжфазових меж) [1]. Навіть у цьому випадку чисельний розв'язок означає узагальнену задачу

Стефана про взаємну дифузію з концентраційно залежним коефіцієнтом дифузії в кожній окремій фазовій області з відповідними крайовими умовами у вигляді балансів потоків на рухомих міжфазових межах. При цьому виникають проблеми з узгодженням вибору розбиття на скінченні інтервали в сусідніх фазових прошарках, проблема узгодження цих дискретних розбиттів із неперервним рухом меж тощо. Виникає також проблема чисельного еквівалента граничних умов на «лівій і правій нескінченностях» - адже при еквідистантній дискретній просторовій сітці для кінцевих різниць треба десь її закінчувати, ще не доходячи до нескінченностей і в той же час не примушувати систему в крайніх точках мати фіксовані концентрації або їх градієнти (граничні умови першого або другого роду).

Частковий вихід із вказаних труднощів дає наближення майже постійних по координаті потоків всередині кожного прошарку проміжної фази, справедливості якого доведена для фаз із вузькими концентраційними інтервалами [2-4]. Цей підхід закриває питання про явний вигляд концентраційного профілю всередині кожного фазового прошарку. Цей профіль, виявляється, на кінетику росту фази майже не впливає, як і конкретна концентраційна залежність коефіцієнта всередині кожного інтервалу гомогенності – впливає лише інтеграл від цього коефіцієнта взаємної дифузії по інтервалу гомогенності – коефіцієнт дифузії за Вагнером. А саме, дифузійний потік окремого з компонентів (наприклад, В) в загальному випадку для довільної і-ї проміжної фази (приблизно однаковий в усіх перерізах фазового прошарку) можна розрахувати виходячи зі значень Вагнерівських коефіцієнтів дифузії, для цих компонентів:

$$\Omega j_B^{(i)} = \frac{-\int_{C_L^{(i)}}^{C_R^{(i)}} \bar{D} dC}{\Delta x_i} = \frac{-\bar{D}_i \Delta C_i}{\Delta x_i} \equiv -\frac{D_w^{(i)}}{\Delta x_i} \quad (1)$$

і цей потік, відповідно, майже однаковий на лівій і на правій границях даної фази.

Задача ще спрощується, якщо можна знехтувати розчинністю А в В і В в А. У випадку системи, де можливий ріст трьох проміжних фаз, а «крайні фази» (розчини А в В і В в А) відсутні (формально мають нульову концентраційну ширину або/і нульові середні коефіцієнти дифузії) рівняння балансу потоків набувають вигляду:

$$\begin{aligned} (c_L^{(1)} - 0) \frac{dx_{1L}}{dt} &= 0 - \frac{D_1 \Delta c_1}{\Delta x_1}, \\ (c_L^{(2)} - c_R^{(1)}) \frac{dx_{2L}}{dt} &= \frac{D_1 \Delta c_1}{\Delta x_1} - \frac{D_2 \Delta c_2}{\Delta x_2}, \\ (c_L^{(3)} - c_R^{(2)}) \frac{dx_{3L}}{dt} &= \frac{D_2 \Delta c_2}{\Delta x_2} - \frac{D_3 \Delta c_3}{\Delta x_3}, \\ (1 - c_R^{(3)}) \frac{dx_{3R}}{dt} &= \frac{D_3 \Delta c_3}{\Delta x_3} - 0 \end{aligned} \quad (2)$$

В загальному випадку рівняння для одночасного товщини проміжних фаз, аналогічно до рівнянь (1) та (2), мають вигляд:

$$\frac{d\Delta X_i}{dt} = \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{(c_{i+1} - c_i)(c_i - c_{i-1})} \frac{D_i \Delta c_i}{\Delta X_i} - \left[\frac{D_{i+1} \Delta c_{i+1}}{(c_{i+1} - c_i) \Delta X_{i+1}} + \frac{D_{i-1} \Delta c_{i-1}}{(c_i - c_{i-1}) \Delta X_{i-1}} \right], \quad (3)$$

$i = 1..n$

При цьому для крайніх фаз (розчини а в В і В в А) припускається нульова розчинність і нульові потоки: $c_i|_{i=0} = 0$, $c_i|_{i=n+1} = 1$, $\left. \frac{D_i \Delta c_i}{\Delta X_i} \right|_{i=0} = 0$, $\left. \frac{D_i \Delta c_i}{\Delta X_i} \right|_{i=n+1} = 0$

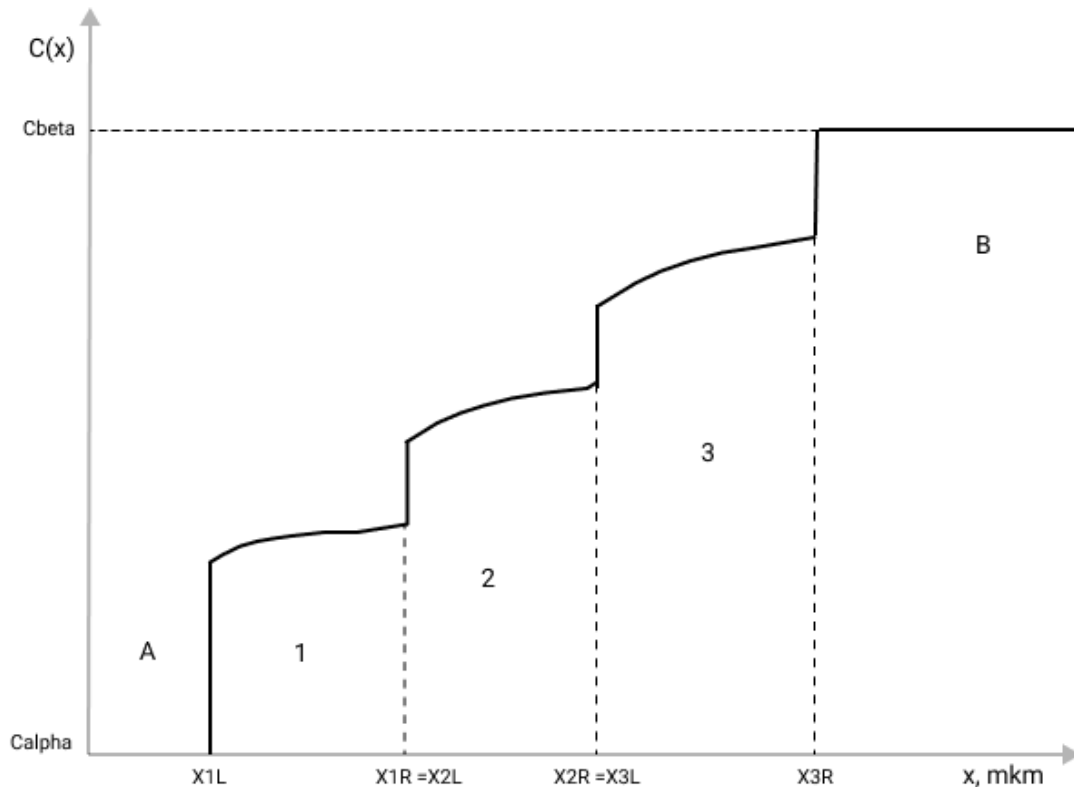


Рис. 1. Профіль концентрації у випадку росту трьох проміжних фаз.

Fig. 1. Concentration profile in case of three intermediate phase growth.

Однак, застосування навіть цих спрощених рівнянь (3) в деяких випадках є проблемним. По-перше, далеко не всі проміжні фази мають вузьку область гомогенності, а це є основна умова квазістаціонарності. По-друге, в багатьох реальних випадках, принаймні з одного боку дифузійної пари, розчинність у одному з матеріалів не можна вважати нульовою. Крім того, при застосуванні до реакцій у тонких плівках необхідно постійно слідкувати за перерозподілом потоків проміжних фаз після вичерпання спочатку однієї з крайніх фаз (розчину), а потім і тих проміжних фаз, які одна за одною стають крайніми а враховуючи те, що проміжні фази можуть народжуватись і зникати, то чисельний розв'язок рівняння (3) потребує певних алгоритмічних нюансів з народженням зародків проміжних фаз та забезпечення при цьому закону збереження матерії.

2. Псевдоконтинуальний підхід до моделювання утворення, росту і конкуренції проміжних фаз.

Бінарну дифузійну систему характеризують концентраційними залежностями (або наближеними середніми значеннями) всередині кожного концентраційного інтервалу гомогенності усіх проміжних фаз. Перепади концентрацій між цими інтервалами гомогенності є двофазними областями на діаграмі станів: кожна точка всередині такої

області відповідає на якійсь одній фазі (розчину чи впорядкованій сполуці), а суміші двох фаз у рівновазі між собою. Дві різних точки всередині однієї двофазної області відповідають двом сумішам одних і тих же двох рівноважних між собою фаз. Тому перепад концентрацій всередині двофазної області не означає перепаду хімічних потенціалів (той залишається нульовим) і тому не призводить до дифузійного потоку (той теж залишається нульовим). Якщо таку ситуацію продовжувати описувати законом Фіка, то в описаних випадках ненульовий градієнт концентрації може давати нульовий потік лише якщо коефіцієнт дифузії в першому законі Фіка дорівнює нулю. Тому ми пропонуємо описувати реакційну дифузію не як кілька дифузійних задач у фазових областях, пов'язаних граничними умовами балансу потоків на рухомих міжфазних межах, а як одну дифузійну задачу у всьому інтервалі концентрацій від А до В з кусочно-неперервною залежністю коефіцієнта взаємної дифузії. А саме, зручно використати в

якості регулятора росту фаз ступінчастий профіль коефіцієнта взаємної дифузії $\tilde{D}$, в якому на ділянках, де необхідно забезпечити (при ненульових стрибках концентрацій) нульовий стрибок хімічних потенціалів, коефіцієнт дифузії рівний нулю (як показано на рис 2.). В такому випадку достатньо задати інтервали існування фаз для отримання профілів концентрації при реакційній дифузії для заданих інтервалів існування фаз.

Тоді для розрахунку профілю концентрації при реакційній дифузії достатньо використати рівняння другого закону Фіка для залежного від концентрації коефіцієнта дифузії:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{D}(c) \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (3)$$

Для коефіцієнта дифузії можна використати наступну залежність:

$$\tilde{D}(c) = \begin{cases} D_{\alpha}(c), & 0 \leq c \leq c_{\alpha} \\ \dots \\ 0, & c_{(n-1)R} \leq c < c_{nL} \\ D_n(c), & c_{nL} \leq c < c_{nR}, \quad n = 1..N \\ 0, & c_{nR} \leq c < c_{\beta} \\ \dots \\ D_{\beta}(c), & c_{\beta} \leq c \leq 1 \end{cases} \quad (4)$$

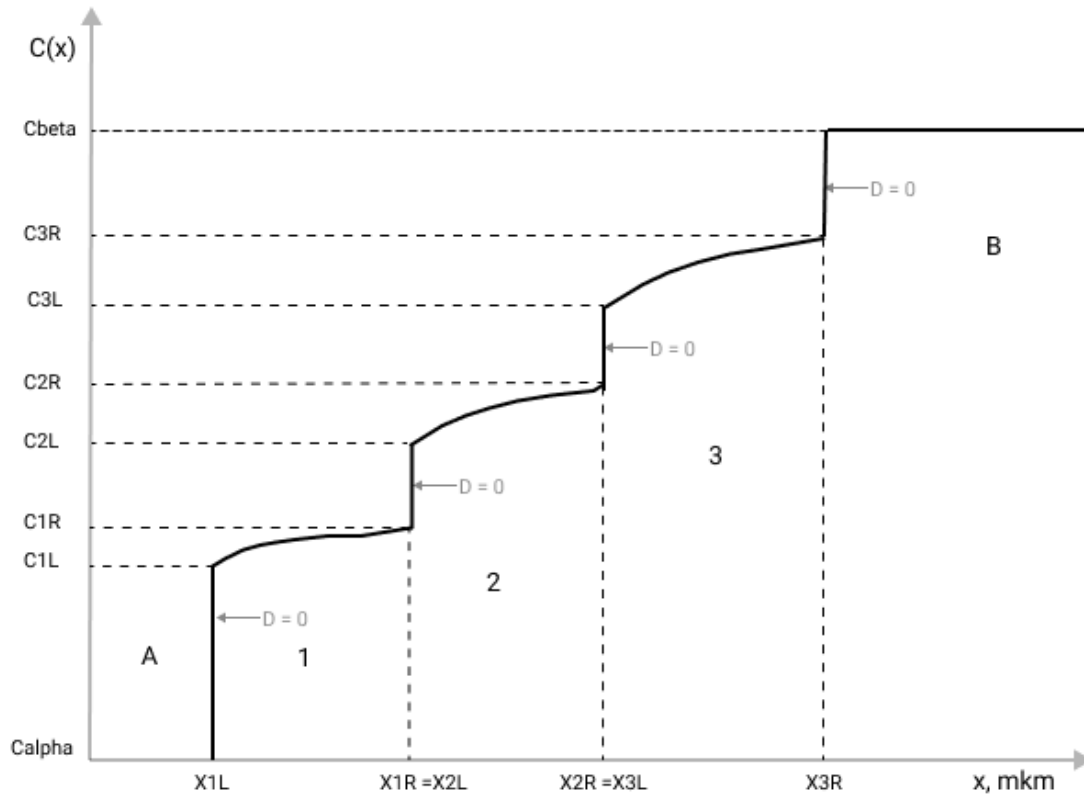


Рис.2. Профіль концентрації для трьох проміжних фаз при реакційній дифузії. ($D = 0$ вказує на двофазні концентраційні області, на яких необхідно задати нульовий коефіцієнт дифузії, C_{nL}, C_{nR} , $n=1,2,3$ – концентраційні межі проміжної фази).

Fig. 2. Concentration profile for three intermediate phases in reaction diffusion. ($D = 0$ corresponds to the two-phaser concentration, C_{nL}, C_{nR} , $n=1,2,3$ - intermediate phase concentration bounds).

Для чисельного розв'язання рівняння дифузії із концентраційно залежним коефіцієнтом дифузії використано наступну чисельну схему:

$$c_{i+1,j} = c_{i,j} + \frac{\Delta t}{h} \left[a_{i,j+1} \frac{c_{i,j+1} - c_{i,j}}{h} - a_{i,j} \frac{c_{i,j} - c_{i,j-1}}{h} \right], \quad (5)$$

$$a_{i,j} = \frac{1}{2} (D_{i,j} + D_{i,j-1}), \quad a_{i,j+1} = \frac{1}{2} (D_{i,j+1} + D_{i,j}),$$

де Δt - крок по часу, i -номер кроку по часу, h - крок по просторовій координаті, в якій відбувається дифузійний перерозподіл.

3. Метод оптимізації розрахунку дифузійних профілів у нескінченній дифузійній парі.

Розрахунок дифузійних профілів в бінарній системі потребує значних обчислювальних ресурсів, коли необхідно розрахувати профіль концентрації для достатньо великих зразків, однак схема насправді є неоптимальною. Під час розрахунку важливішими є значення концентрації в точках, найближчих до дифузійної зони, ніж на краях зразків. Для досягнення більш оптимального результату запропоновано ввести нерівномірну шкалу для просторової координати, та здійснити перетворення рівняння другого закону Фіка до форми, придатної для розрахунку в нерівномірній шкалі просторових координат. Найбільш зручною функцією для перетворення є тангенс,

оскільки зміна аргумента тангенса від $-\pi/2$ до $+\pi/2$ відповідає зміні функції від мінус нескінченності до плюс нескінченності. Ідею використати подібне перетворення у свій час підказав одному з авторів проф. Борис Головня. Для зручності здійсимо заміну змінної просторової координати (для одновимірного випадку):

$$x = \frac{2L}{\pi} \operatorname{tg}\left(\frac{\pi y}{2L}\right), \quad (6)$$

де L - довжина інтервалу, на який необхідно масштабувати координату.

Зауважимо, що тоді як координата x може приймати значення від мінус до плюс нескінченності, нова координата y змінюється в скінченному інтервалі від $-L$ до $+L$, довжину якого можемо вибирати із міркувань оптимізації алгоритму. При цьому еквідистантні інтервали змінної y відповідають нерівномірній сітці для змінної x , так що в центральній області дифузійної зони інтервал найменший, а далеко від центру – найдовший.

Відповідно диференціал dx виражено наступним виразом:

$$dx = \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\pi y}{2L}\right)} dy \quad (7)$$

Оператор диференціювання $\frac{\partial}{\partial x}$ набуде вигляду:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos^2\left(\frac{\pi y}{2L}\right) \frac{\partial}{\partial y} \quad (8)$$

Застосувавши оператор (8) до правої частини рівняння (3), отримаємо:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \cos^4\left(\frac{\pi y}{2L}\right) \frac{\partial}{\partial y} \left[D(c(y)) \frac{\partial c}{\partial y} \right] = \cos^4\left(\frac{\pi y}{2L}\right) \left[\frac{\partial D(c)}{\partial c} \left(\frac{\partial c}{\partial y} \right)^2 + D(c) \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right] \quad (9)$$

Перетворивши чисельну схему (5) згідно з рівнянням (9) отримаємо оптимізовану схему:

$$c_{i+1,j} = c_{i,j} + \frac{dt}{dy} \left[\cos^4\left(\frac{\pi y}{2L}\right) \right] \left[a_{i,j+1} \frac{c_{i,j+1} - c_{i,j}}{dy} - a_{i,j} \frac{c_{i,j} - c_{i,j-1}}{dy} \right], \quad (10)$$

$$a_{i,j} = \frac{1}{2} (D_{i,j} + D_{i,j-1}), \quad a_{i,j+1} = \frac{1}{2} (D_{i,j+1} + D_{i,j})$$

4. Дослідження біфуркації кіркендалових площини та руху маркерів.

Після відкриття у 1947 році ефекту Кіркендала (рух інертних маркерів у дифузійній зоні, який свідчить про рух решітки як цілого у дифузійній зоні, викликаний нерівністю парціальних коефіцієнтів дифузії) це явище вважається фундаментом наших уявлень про взаємну дифузію і доведенням вакансійного механізму. При цьому ніхто не задавав питання, чому власне ряд вставлених в площину вихідного контакту інертних маркерів повинен продовжувати рухатись у вигляді цієї ж площини. Виявляється, цей факт не є загальним правилом. Близько 20 років тому група дослідників із Технічного Університету Ейндховена під керівництвом проф. Франса Ван Лоо (і в яку тимчасово входив і один із авторів даної статті) відкрила можливість біфуркацій та нестабільностей площин Кіркендала при взаємній дифузії [5-7]. Для детального вивчення і прогнозування подібних ефектів необхідно мати швидкодіючу програму прогнозування

еволюції руху решітки і перерозподілу інертних маркерів у дифузійній зоні. При цьому потрібно моделювати довгі періоди дифузійних відпалів і широкі дифузійні зони. Тому для оптимізації розв'язку рівняння дифузії використано схему оптимізації розв'язку, описану в розділі 3. Згідно з аналізом Даркена, коефіцієнт взаємної дифузії і розподіл швидкостей руху маркерів у довільній точці дифузійної зони визначається рівняннями (12) і (13):

$$\tilde{D}(c) = c \cdot D_A(c) + (1-c) \cdot D_B(c) \quad (11)$$

$$g = (D_B - D_A) \frac{\partial c}{\partial x} \quad (12)$$

Зручно для дослідження можливих нестабільностей і біфуркацій площини Кіркендала використати наступні концентраційні залежності парціальних коефіцієнтів дифузії:

$$\begin{aligned} D_A(c) &= D_{A0} \exp(-\alpha_A c), \\ D_B(c) &= D_{B0} \exp(-\alpha_B (1-c)) \end{aligned} \quad (13)$$

де, α_A, α_B - масштабні множники $\sim 1 \div 10$, $D_{A0}, D_{B0} \sim 10^{-14} \frac{m^2}{c}$.

Швидкість руху маркера поблизу площини можна визначити зі співвідношення для швидкості течії ґратки за Даркеном (12).

Зручніше швидкість розраховувати з оптимізованої схеми через наступний вираз:

$$v = \cos^2\left(\frac{\pi y}{2L}\right) (D_B - D_A) \frac{\partial c}{\partial y}. \quad (14)$$

5. Результати чисельних експериментів.

5.1. Моделювання конкуренції фаз в бінарній дифузійній системі з використанням псевдоконтинувального підходу.

Для побудови комп'ютерної моделі був використаний підхід, описаний в розділі 2.

Використано граничні умови другого роду для рівняння дифузії.

Для забезпечення більш швидкого фазоутворення у якості початкової умови використано функцію помилок вигляду:

$$c_0(x) = \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{\max} kdt}}\right), \quad k \in \mathbb{N} \quad (15)$$

де, $D_{\max}$ - максимальне значення коефіцієнта дифузії, kdt - кількість кроків для забезпечення початкового розповзання дифузійного профілю.

У випадку росту однієї фази, залежно від середньої концентрації, за якої існує фаза, спостерігається ситуація під'їдання материнської фази (α , або β , рис. 3)

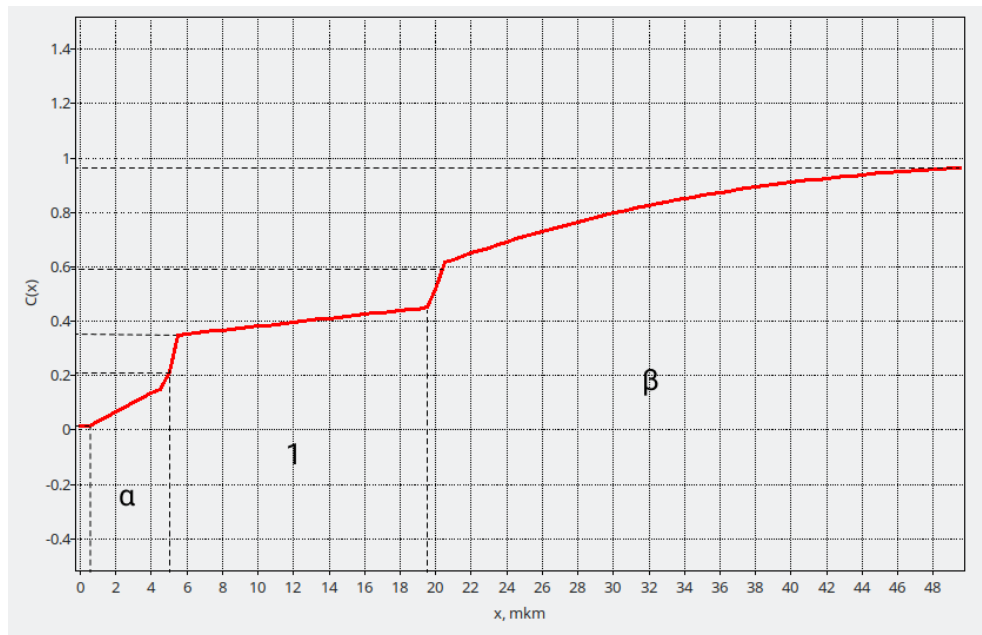


Рис. 3. Профіль концентрації у випадку росту однієї проміжної фази
Fig. 3. Concentration profile in case of single intermediate phase growth

У випадку, коли наявна материнська фаза, квадрат ширини нової, проміжної фази зростає за лінійним законом, що узгоджується з параболічним законом росту фаз. Після повного перетворення материнської фази ріст сповільнюється і припиняється (рис. 4.)

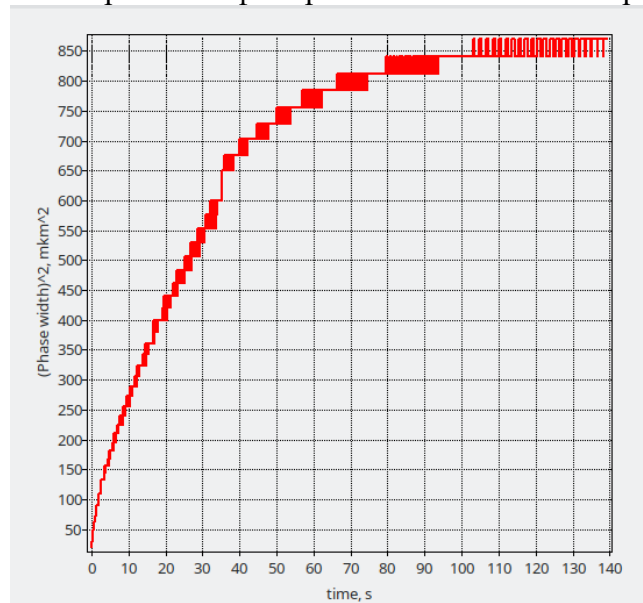


Рис. 4. Залежність квадрату товщини фази від часу дифузії у випадку росту однієї фази.
Прямолінійна ділянка відповідає параболічному закону. По мірі вичерпання материнських фаз у тонкій плівці ріст проміжної фази припиняється.

Fig. 4. Squared phase width dependence on time in case of single phase growth

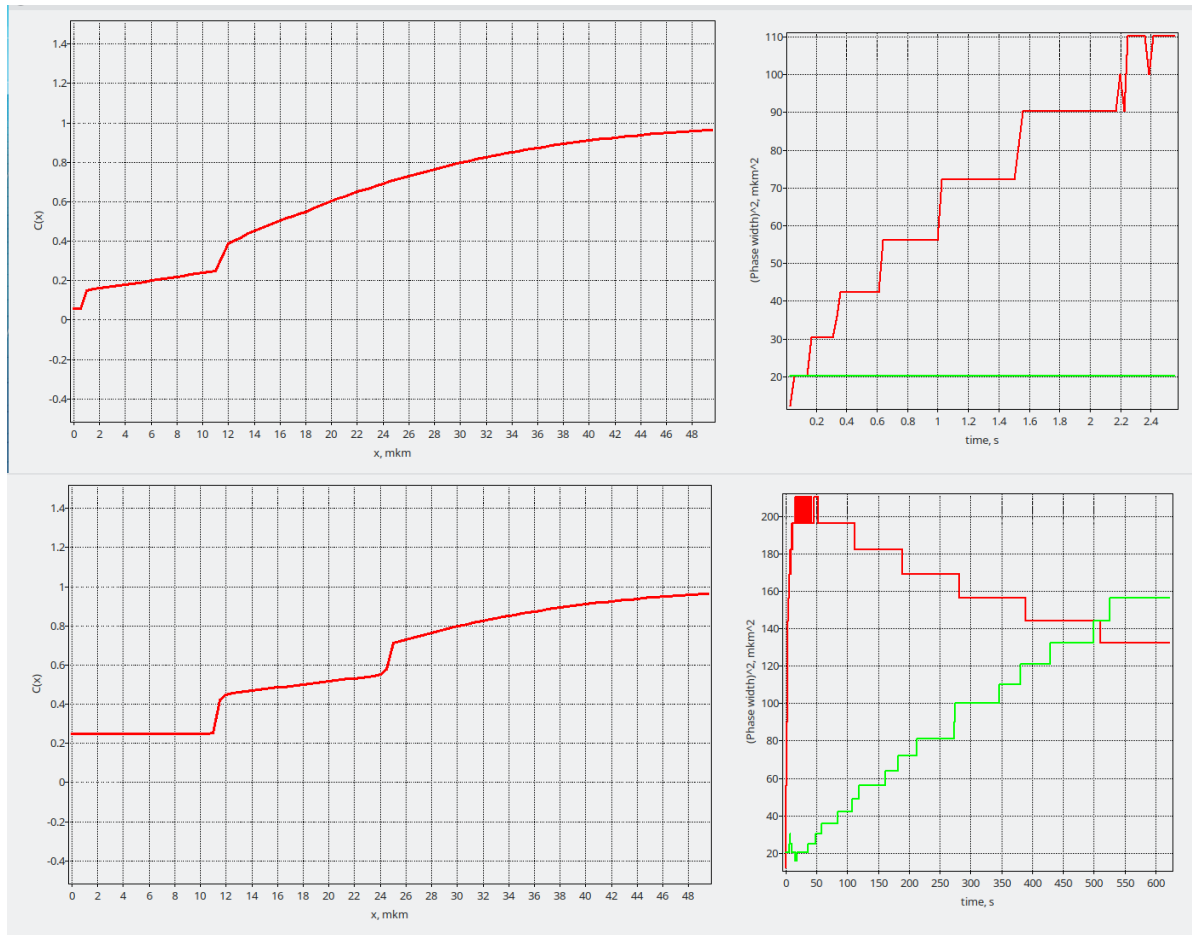
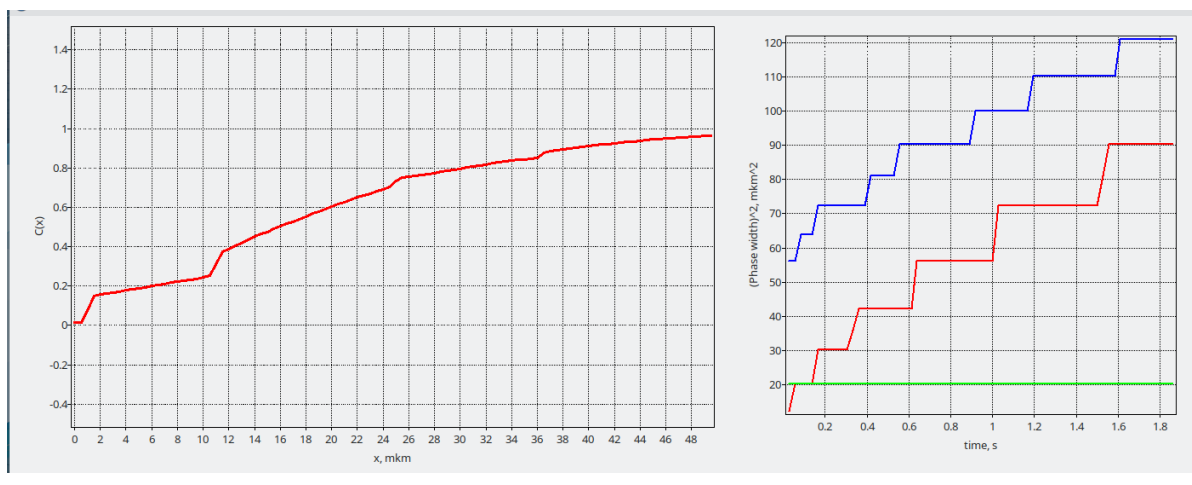


Рис. 5. Дифузійний профіль та залежність квадрату ширини фази від часу на: а – початку фазоутворення; б – під час конкуренції двох фаз.

Fig. 5. Concentration profile and the squared phase width time dependence: a – at initial stage, b – during phase competition stage.

У випадку росту двох фаз, коли власний коефіцієнт дифузії однієї з проміжних фаз значно перевищує коефіцієнт дифузії іншої, спостерігається ситуація, коли пригнічена у рості фаза, починає конкурувати з сусідньою фазою, товщина якої була більша, поступово зменшуючи загальну товщину цієї фази (рис. 5).



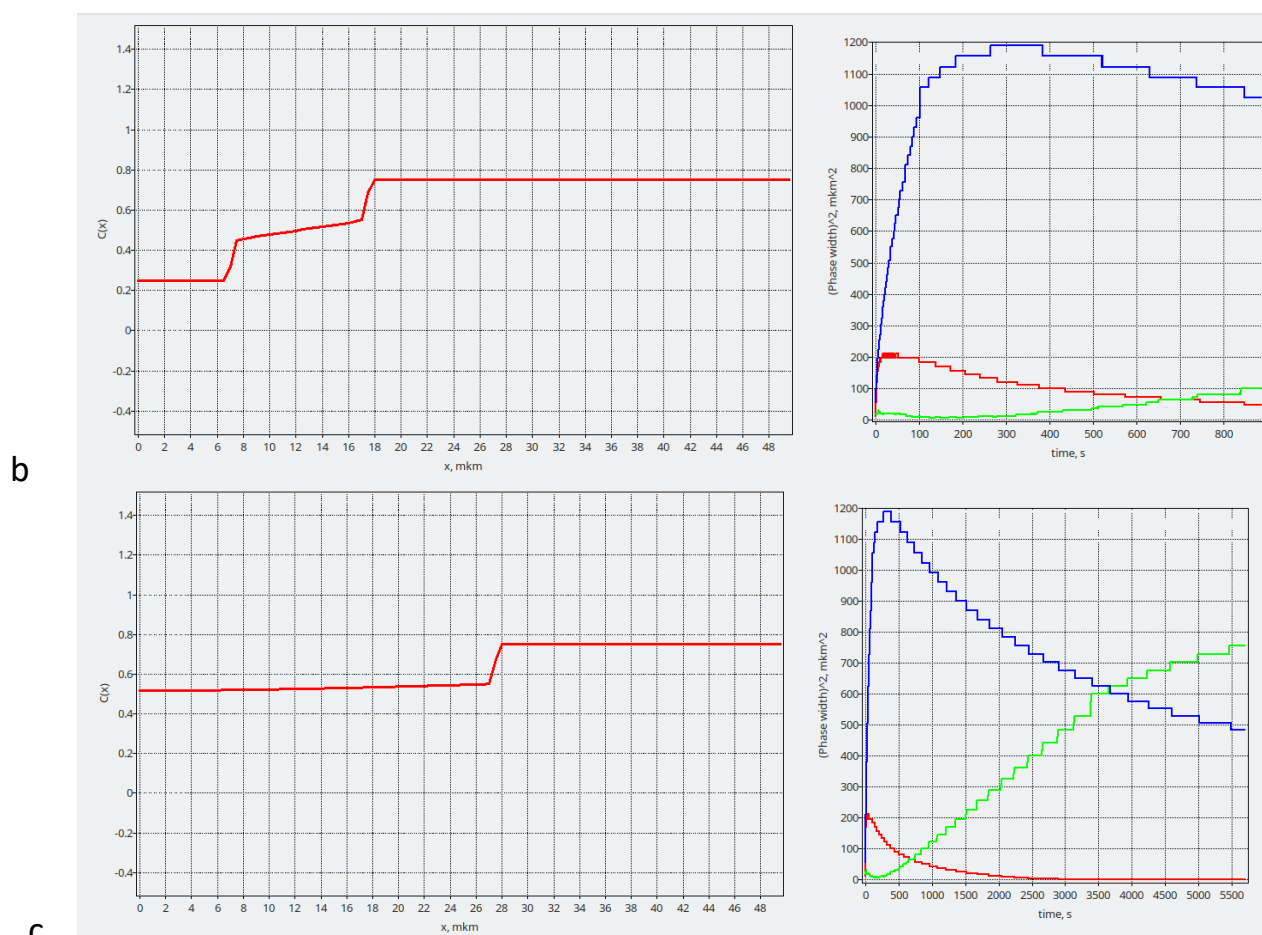


Рис. 6. Ріст трьох фаз: а – початок фазоутворення; б – конкуренція двох сусідніх фаз, с – пригнічення першої проміжної фази, конкуренція другої та третьої проміжних фаз.
 Fig. 6. Three phases growth: a – initial stage; b – two neighbour phases competition; c – first intermediate phase inhibition; c – competition of second and third intermediate phases.

У випадку росту трьох фаз, коли коефіцієнт дифузії проміжної, центральної фази більший ніж у сусідніх спостерігається ситуація, коли центральна фаза, спочатку пригнічена, поступово пригнічує фазу що знаходиться нижче в інтервалі концентрацій. Далі спостерігається конкуренція фаз, що залишились з поступовим пригніченням фази з меншим власним коефіцієнтом дифузії.

5.2. Моделювання руху маркерів та біфуркації площини Кіркендала

Для моделювання ефекту Кіркендала в бінарній дифузійній системі використано чисельну схему, описану в розділі 4.

Для оптимізації розрахунків використано чисельну схему (11).

Початкова умова для рівняння дифузії наступна:

$$c(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases} \quad (16)$$

Швидкість руху маркерів описується рівнянням (14). Маркери розподілені випадковим чином у вузькому інтервалі.

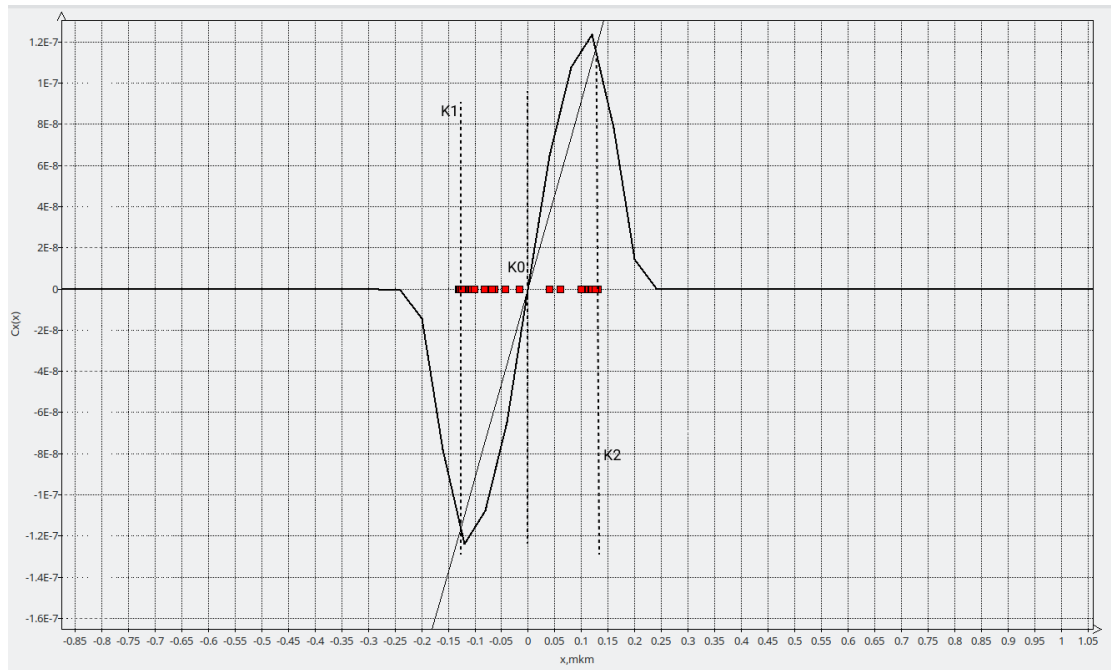


Рис. 7. Біфуркація площини Кіркендала а точніше розщеплення на дві стабільні та одну нестабільну площину

Fig. 7. Kirkendal plane bifurcation into two stable and one unstable planes

У випадку коли $\alpha_A = \alpha_B$ співвідношень (13) ми маємо ситуацію, що площина Кіркендала розділяється на три площини (одну нестабільну в нулі координат) та дві стабільні з протилежних сторін. З рис. 7 зрозуміло, що маркери намагаються рухатись від нестабільної площини до стабільних, при цьому рух маркерів нерівномірний.

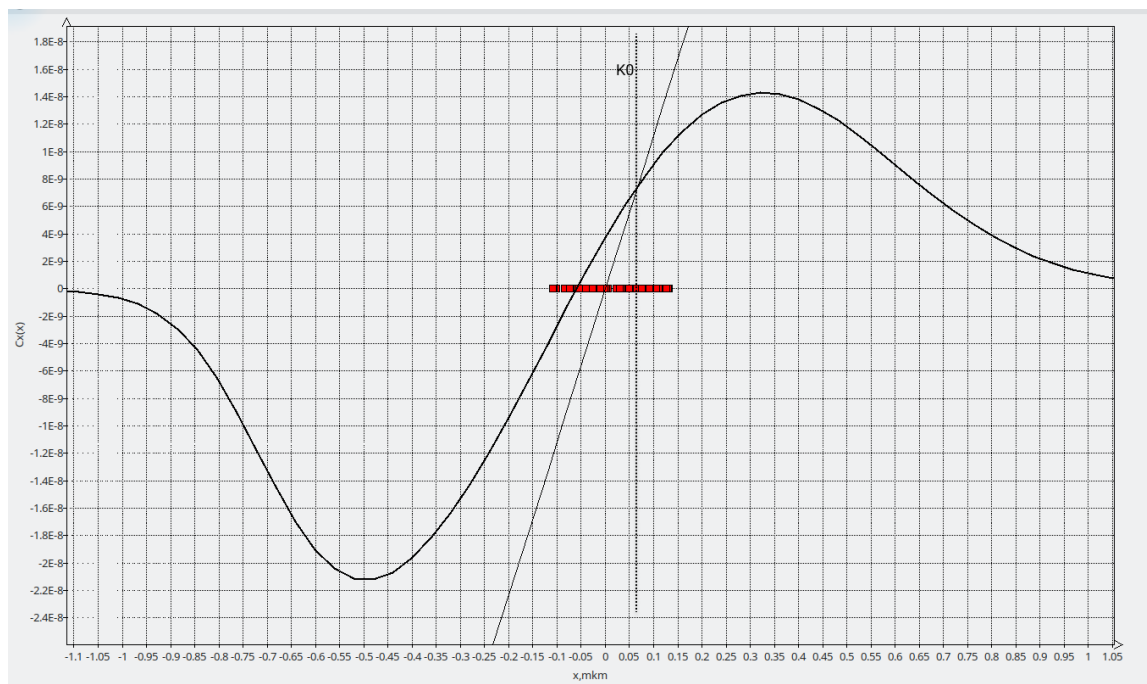


Рис. 8. Рух маркерів за наявності лише однієї нестабільної площини Кіркендала

Fig. 8. Markers moving only by one unstable Kirkendal plane

У випадку коли $\alpha_A \gg \alpha_B$ за умови, що ми працюємо з інкрементальною парою, маємо ситуацію нестійкої площини Кіркедала (рис. 8), коли маркери просто «розбрідаються» від початкового вузького розподілу координат, не формуючи жодної площини.

6. Висновки

Розроблений метод моделювання росту фаз в бінарних дифузійних системах дозволяє спростити алгоритм опису фазоутворення та краще підходить для випадків конкурентного фазоутворення в тонких плівках і у випадках проміжних фаз із досить широкими областями гомогенності. Крім того, алгоритм автоматично усуває проблему зародкоутворення проміжних фаз. Також усувається і проблема збереження матерії.

У випадку росту однієї фази можна сверджувати про параболічний закон росту лише до моменту виснаження материнської фази, надалі ріст фази сповільнюється і закон росту змінюється.

У випадку росту двох фаз параболічний закон росту може виконуватись для фази, що знаходиться поблизу материнської фази. Для фаз, які конкурують між собою в обмеженій дифузійній парі, параболічний закон, природньо, не виконується.

У випадку росту трьох фаз, якщо власний коефіцієнт дифузії центральної проміжної фази значно більший, ніж сусідніх, навіть, якщо фаза була пригніченою в рості, вона може утворитись та конкурувати з поступовим пригніченням сусідніх фаз.

Модель, що описана в розділі 4, демонструє, що маркери, початково зосереджені поблизу контактної інтерфейсу, можуть перерозподілятися між рухомими атракторами. При цьому Кіркендалова площа, яка відповідає перетину прямої $V=(1/2t)*X$ з кривою швидкостей $V(X)$ на ділянці додатньої похідної dC/dX , є нестабільно. Маркери від неї або перетікають до інших (стабільних) площин, якщо вони є, або взагалі «розбрідаються», означаючи «забування системою» вихідного місця контакту.

Подяки

Робота підтримана Міністерством науки та освіти України.

Список використаної літератури:

1. Гуров, К. П., Карташкин, Б. А., & Угасте, Ю. Э. Взаимная диффузия в многофазный металлических системах. Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. – 1981. – 360 с.
2. Gusak A. M. A simple way of describing the diffusion phase growth in cylindrical and spherical samples. / A. M. Gusak, M. V. Yarmolenko // Journal of applied physics. –1993. – Vol. 73, No. 10, P. 4881-4884. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.353805>
3. Gusak A. M. (2010). Diffusion-controlled solid state reactions: in alloys, thin films and nanosystems / A. M. Gusak, T. V. Zaporozhets, Y. O. Lyashenko, S. V. Kornienko, M. O. Pasichnyy, A. S. Shirinyan // John Wiley & Sons. – 2010. – P. 498. – Режим доступу: ISBN: 978-3-527-64156-7
4. Гусак А. М. Моделі твердофазних реакцій – нові результати. Монографія / А. М. Гусак, Т. В. Запорожець, Ю. О. Ляшенко, В. М. Пасічна, М. О. Пасічний, Н. В. Сторожук // Харків. – 2021. – 392 с. – Режим доступу: ISBN 978-617-7886-17-3
5. Van Dal M. J. H. Microstructural stability of the Kirkendall plane in solid-state diffusion / M. J. H. Van Dal, A. M. Gusak, C. Cserhádi, A. A. Kodentsov, F. J. J. Van Loo // Physical review letters. – 2001. – Vol. 86, No. 15. – P. 3352. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.3352>

6. Van Dal M. J. H. Spatio-temporal instabilities of the Kirkendall marker planes during interdiffusion in β' -AuZn / M. J. H. Van Dal, A. M. Gusak, C. Cserháti, A. A. Kodentsov, F. J. J. Van Loo // *Philosophical magazine A*. – 2002. – Vol. 82, No. 5. – P. 943-954. Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/01418610208240011>
7. Kodentsov, A. A., Paul, A., Van Dal, M. J. H., Cserháti, C., Gusak, A. M., & Van Loo, F. J. J. (2008). On the spatial stability and bifurcation of the Kirkendall plane during solid-state interdiffusion. / A. A. Kodentsov, A. Paul, M. J. H. Van Dal, C. Cserháti, A. M. Gusak, F. J. J. Van Loo // *Critical reviews in solid state and materials sciences*. – 2008. – Vol. 33, No. 3-4. – P. 210-233. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/10408430802462958>

References:

1. Gurov, K. P., Kartashkin, B. A., & Ugaste, Y. E. (1981) Mutual diffusion in multiphase metallic systems, "Nauka", p. 360.
2. Gusak, A. M., & Yarmolenko, M. V. (1993). A simple way of describing the diffusion phase growth in cylindrical and spherical samples. *Journal of applied physics*, 73(10), 4881-4884. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.353805>
3. Gusak, A. M., Zaporozhets, T. V., Lyashenko, Y. O., Kornienko, S. V., Pasichnyy, M. O., & Shirinyan, A. S. (2010). Diffusion-controlled solid state reactions: in alloys, thin films and nanosystems. *John Wiley & Sons*. Retrieved from ISBN: 978-3-527-64156-7
4. Gusak, A. M., Zaporozhets, T. V., Lyashenko, Y. O., Pasichna, V. M. (2021) Models of solid phase reactions - new results. Another. *SG NTM "New course"*, Kharkiv. Retrieved from ISBN 978-617-7886-17-3
5. Van Dal, M. J. H., Gusak, A. M., Cserháti, C., Kodentsov, A. A., & Van Loo, F. J. J. (2001). Microstructural stability of the Kirkendall plane in solid-state diffusion. *Physical review letters*, 86(15), 3352. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.3352>
6. Van Dal, M. J. H., Gusak, A. M., Cserháti, C., Kodentsov, A. A., & Van Loo, F. J. J. (2002). Spatio-temporal instabilities of the Kirkendall marker planes during interdiffusion in β' -AuZn. *Philosophical magazine A*, 82(5), 943-954. Retrieved from <https://doi.org/10.1080/01418610208240011>
7. Kodentsov, A. A., Paul, A., Van Dal, M. J. H., Cserháti, C., Gusak, A. M., & Van Loo, F. J. J. (2008). On the spatial stability and bifurcation of the Kirkendall plane during solid-state interdiffusion. *Critical reviews in solid state and materials sciences*, 33(3-4), 210-233. Retrieved from <https://doi.org/10.1080/10408430802462958>

A. R. Honda

PhD-student, Cherkasy State University, Cherkasy, Ukraine

andriy.gonda@vu.cdu.edu.ua

A. M. Gusak

Professor, Doctor in Physics,

Cherkasy State University, Cherkasy, Ukraine

amgusak@ukr.net

DIFFUSION "SURPRISES" IN INTERDIFFUSION MODELS

Optimized algorithm of solution diffusion problem was described by using the non-equidistant space coordinate scale. The quasi-stationary model of reactive diffusion is described. The optimal diffusion-based phase growth and competition in binary system algorithm are introduced.

Numeric modeling of phase growth and competition for one, two, and three intermediate phases is performed by two alternative ways. First, phase layer growth is computed under steady-state approximation and with zero solubility of A in B and B in A. Second, phase growth in multiphase binary couple is computed by direct numeric solving of the second Fick's law over total diffusion couple with interdiffusion coefficient being a piecewise continuous function of concentration, equal to zero everywhere beyond the homogeneity ranges of intermediate and marginal phases. Both approaches provide parabolic laws for infinite diffusion couples and give similar descriptions of the phase growth kinetics.

It was shown that for the single intermediate phase growth case the parabolic growth law is valid till the beginning of the parent phase depletion. The intermediate phase growth slows down after parent phase depletion. For two phase growth case the parabolic growth law can be valid for the phase that is placed near the parent phase. For three intermediate phase growth when the central phase partial diffusion coefficient is greatest than the nearest phases diffusion coefficients phase can grow, compete and inhibit nearest phases.

The inert markers motion around diffusion pair interface plane model was developed and optimized. The Kirkendal plane instability and bifurcation was investigated.

*The model demonstrates that the markers, initially distributed in the vicinity of contact interface, may be further redistributed between moving attractors. At the same time, the stable K-planes are marker attractors. Furthermore, the K-plane that refers to the $V=(1/2t)*X$ intersection line with velocity curve $V(X)$ at the positive derivative of dC/dX , is unstable. In this case the inert markers disperse from unstable K-plane to stable K-planes if they exist.*

Keywords: interdiffusion, reactive diffusion, phase competition, Kirkendal effect, diffusion markers, computational methods in physics.

Одержано редакцією 15.07.2022

Прийнято до друку 22.08.2022

ORCID: 0000-0002-8868-0498

Ю. А. Андрєєва

Магістр математики,

Донецький національний університет імені Василя Стуса Вінниця, Україна,

jandreieva7@gmail.com

ORCID: 0000-0002-3363-2229

К. О. Буряченко

Канд. фіз.-мат.наук, доцент,

Донецький національний університет імені Василя Стуса Вінниця, Україна,

k.buriachenko@donnu.edu.ua

DOI 10.31651/2076-5851-2022-61-69

PACS 02, 02.30, 02.60

АНАЛОГ ПРИНЦИПУ МАКСИМУМУ ДЛЯ КОЛИВНИХ ПРОЦЕСІВ

Принцип максимуму є дієвим інструментом для дослідження якісних властивостей розв'язків рівнянь в частинних похідних. Як відомо з курсу рівнянь математичної фізики, для рівнянь еліптичного та параболічного типів принцип максимуму є дослідженим, відомим фактом, а також вивчено його застосування в прикладних задачах математичної фізики. Водночас, для рівнянь гіперболічного типу класичний принцип максимуму не виконується, але виникає потреба в його доведенні, навіть в слабкому вигляді, та його подальшому застосуванні як дієвого інструменту дослідження якісних властивостей розв'язків рівнянь гіперболічного типу. Наразі є лише деякі результати, в яких було побудовано принцип максимуму для гіперболічних рівнянь та систем другого порядку. Отже, дослідження аналогів принципу максимуму для різноманітних рівнянь гіперболічного типу є актуальною проблемою в теорії рівнянь в частинних похідних.

Об'єкт дослідження: Хвильове рівняння, принцип максимуму, задача Коші для рівняння коливання струни з молодшими членами; задачі на характеристиках.

Предмет дослідження: Аналог принципу максимуму для рівнянь гіперболічного типу. Мета роботи: Доведення аналогу принципу максимуму для рівнянь гіперболічного типу з молодшими членами. Для реалізації поставленої мети в роботі вирішено наступні завдання: вивчено метод отримання принципу максимуму для простішого гіперболічного рівняння коливання одновимірної струни без молодших членів, який полягає в методі характеристик, та застосуванні теореми Стокса у випадку класичних розв'язків; отримано за допомогою вивченого методу аналогу принципу максимуму для хвильового рівняння з молодшими членами типу амплітуд; отримано слабкий принцип максимуму для хвильового рівняння з молодшими членами першого порядку. Науковою новизною роботи є доведення принципу максимуму для гіперболічних рівнянь другого порядку з молодшими членами, який використовується при доведенні теореми єдиності та неперервної залежності розв'язку мішаних задач, а також задачі Коші для таких рівнянь. Наведено також фізичні моделі та їх аналіз, які приводять для рівнянь в частинних похідних даного виду.

Ключові слова: метод характеристик, рівняння в частинних похідних другого порядку гіперболічного типу, хвильове рівняння, слабкий принцип максимуму, сильні розв'язки, теорема Стокса.

1. Вступ

Принцип максимуму є дієвим інструментом для дослідження якісних властивостей розв'язків рівнянь в частинних похідних. Як відомо з курсу рівнянь математичної фізики, для рівнянь еліптичного та параболічного типу принцип максимуму є дослідженим фактом, а також вивчено його застосування в прикладних задачах математичної фізики. Він дозволяє встановлювати як якісні властивості фізичних процесів, які описуються за допомогою еліптичних та параболічних рівнянь в частинних похідних, так і досліджувати подальші властивості розв'язків таких рівнянь, а також крайових, мішаних та початкових задач для них. Так, за допомогою встановленого класичного принципу максимуму для рівнянь еліптичного та параболічного типів, доволі просто довести властивості єдиності розв'язку деяких задач, а також неперервну залежність від початкових даних, що є важливішою властивістю в подальшому їх застосування під час опису фізичних процесів.

Водночас для рівнянь гіперболічного типу класичний принцип максимуму не виконується, водночас, з огляду на вищесказане, його доведення навіть в слабкому сенсі, є важливою проблемою для подальшого дослідження якісних властивостей розв'язків задач для рівнянь гіперболічного типу. Отже, дослідження цього питання є актуальною проблемою теорії рівнянь математичної фізики.

Вперше доведення принципу максимуму для найпростішого рівняння гіперболічного типу, рівняння коливання одновимірної струни, зв'язалося в роботі Agmon S., Nirenberg, Protter M. в 1953 році, пізніше дослідженням цього питання для гіперболічних рівнянь другого порядку загального вигляду займалися Protter M. H., Weinberger H. [1], які в своїй роботі встановили аналог принципу максимуму для хвильового рівняння, а також розширили свій результат для гіперболічних рівнянь загального вигляду, в тому числі, зі змінними коефіцієнтами та молодшими членами першого порядку. Усі розв'язки, які розглядалися в згаданих роботах, були класичними.

Mawhin J., Ortega R., Robles-Perez A. [2] було доведено принцип максимуму для слабких обмежених розв'язків $u \in L^\infty(R + T^3)$ телеграфного рівняння з параметром λ у тривимірному просторі по просторовій змінній:

$$u_{tt} - \Delta_x u + cu_t + \lambda u = f(t, x),$$

де $c > 0$, $\lambda \in (0, c^2/4]$ і $f \in L^\infty(R + T^3)$. Було вказані точні межі на параметр λ , а також встановлено необхідність умови $c > 0$ для виконання принципу максимуму. Також Clain S. [4] було отримано принцип максимуму для рівнянь гіперболічного типу за допомогою чисельних методів теорії алгоритмів.

У випадку періодичних розв'язків принцип максимуму є природним і був доведений Wang F., An Y.[5] і Li Y.[6] у зв'язку з існуванням та кратністю додатних періодичних розв'язків для нелінійної системи телеграфних рівнянь. Аналог принципу максимуму також досліджувався в роботах Duffin R. J.[7], Protter M. H.[8], Sather D.[9], [10], Sousa R., Guerra M., Yakubovich S.[11], Sloss J. M., Sadek I. S., Bruch Jr. J. C.[12].

В основі даної роботи лежить встановлення аналогу принципу максимуму для рівнянь коливання струни з молодшими членами. Як було вище зазначено, принцип максимуму може використовуватись лише для еліптичних і параболічних рівнянь та дає можливість дослідити якісні властивості розв'язків задач математичної фізики. Ці властивості (єдиність та неперервна залежність розв'язку від початкових даних) задовольняють два пункти означення коректності за Адамаром і є важливим інструментом під час фізичної інтерпретації результатів. Також в роботі буде розглянуто розширений результат для

гіперболічного рівняння з молодшими членами першого порядку та змінними коефіцієнтами:

$$L[u] \equiv au_{xx} + 2bu_{xt} + cu_{tt} + du_x + eu_t,$$

де a, b, c двічі неперервно диференційовані, а d та e неперервно диференційовані функції x і t .

Аналог принципу максимуму для гіперболічних рівнянь можливо побудувати лише в слабкому сенсі, в термінах оцінок. Так, в роботі, слідуючи Mawhin J., Ortega R., Robles-Perez A. [2], ми використовуємо наступне означення слабого принципу максимум для рівнянь гіперболічного типу:

Означення 1. [2] Нехай $L = Lu$ деякий лінійний диференціальний оператор, діючий на функціях $u : D \rightarrow R$, визначених на деякій допустимій [1] множині D . Нехай також ці функції належать деякій сім'ї B , яка складається з граничних, початкових, мішаних або будь-яких інших умов. Будемо казати, що оператор L задовольняє принципу максимуму в слабкому сенсі, якщо з умови

$$L \geq 0, u \in B,$$

випливатиме, що $u \geq 0$ в кожній точці області D .

2. Аналог принципу максимуму для одновимірного хвильового рівняння

Принцип максимуму в класичному сенсі не виконується для розв'язків гіперболічних рівнянь і нерівностей. Дійсно, для найпростішого випадку одновимірного рівняння коливання струни

$$u_{xx} - u_{tt} = 0, \quad (1)$$

легко побачити, що максимум неперервного розв'язку u на множині $D = \{0 < x < \pi, 0 < t < \pi\}$ може знаходитися у внутрішній точці. Дійсно, функція

$$u = \sin x \cdot \sin t$$

є розв'язком наведеного вище рівняння та досягає максимуму в квадраті D у внутрішній точці $(\pi/2, \pi/2)$ цього квадрату. Щоб знайти можливий варіант принцип максимуму для гіперболічних рівнянь, ми досліджуємо природу коректно поставлених граничних та початкових умов для них.

Хвильове рівняння (1) описує поперечний рух однорідної струни під час натягу. Найелементарнішою задачею для такої системи є задача Коші, а також мішані задачі. Розглянемо спочатку задачу Коші: задамо $u, \partial u / \partial t$ при $t = 0$ на деякому інтервалі $2\alpha \leq x \leq 2\beta$.

Фізична інтерпретація принципу максимуму означає, що рух однозначно визначається в межах так званого характеристичного трикутника, тобто трикутника, сторони якого складаються з інтервалу $2\alpha \leq x \leq 2\beta, t = 0$ та утворюють з характеристиками кут $\pm \pi/4$ (див. Рис.1). Демонстрація полягає в отриманні явного розв'язку цієї задачі методом Рімана.

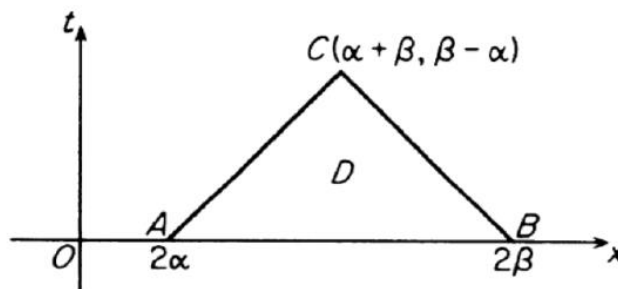


Рис. 1: Характеристичний трикутник

Fig. 1: Characteristic triangle

Нехай u двічі неперервно диференційована функція і диференціальний оператор

$$L[u] \equiv u_{xx} - u_{tt}$$

задано в характеристичному трикутнику D з вершинами $A(2\alpha, 0)$, $B(2\beta, 0)$ і $C(\alpha + \beta, \beta - \alpha)$.

Розглянемо вираз

$$\iint_D L[u] dx dt = \iint_D (u_{xx} - u_{tt}) dx dt,$$

і застосуємо до нього теорему Стокса:

$$\iint_D L[u] dx dt = \int_A^B u_t dx + \int_B^C (u_x dt + u_t dx) + \int_C^A (u_x dt + u_t dx).$$

Оскільки $dx = -dt$ вздовж відрізка BC і $dx = dt$ вздовж CA , маємо:

$$\iint_D L[u] dx dt = \int_A^B u_t dx - \int_B^C (u_x dx + u_t dt) + \int_C^A (u_x dx + u_t dt).$$

Звідки:

$$\iint_D L[u] dx dt = \int_A^B u_t dx + u(A) + u(B) - 2u(C)$$

або

$$u(C) = \frac{1}{2} [u(A) + u(B)] + \frac{1}{2} \int_A^B u_t dx - \frac{1}{2} \iint_D L[u] dx dt. \quad (2)$$

Таким чином, значення u в вершині C характеристичного трикутника однозначно визначається в $u(2\alpha, 0)$, $u(2\beta, 0)$, $\partial u / \partial t$ для $2\alpha < x < 2\beta$, $t = 0$ і $L[u]$ в D .

Зокрема, ми бачимо, що якщо $L[u] \geq 0$ в D та

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) \leq 0, \quad 2\alpha \leq x \leq 2\beta,$$

(3)

то

$$u(C) \leq \frac{1}{2} [u(A) + u(B)]. \quad (4)$$

Якщо ми візьмемо будь-яку точку C' в межах характеристичного трикутника ABC , ми можемо побудувати прямокутний рівнобедрений трикутник $A'B'C'$ з A' і B' на вісі Ox і прямим кутом в C' . Тоді ми знаходимо таким же чином, що

$$u(C') \leq \frac{1}{2} [u(A') + u(B')].$$

З цієї нерівності видно, що значення u в трикутнику ABC не можуть перевищувати максимального значення u на початковому відрізку прямої AB . Таким чином, якщо u задовольняє (3) і (4), її максимум на $D \cup \partial D$ повинен досягатись на початковій прямій AB .

Цей результат є слабким принципом максимуму, оскільки він не дає жодної інформації про те, чи може функція досягти свого максимуму у внутрішній точці. Власне кажучи, функція

$$u(x, t) = \cos x \cdot \cos t$$

задовольняє $L[u] = 0$, також

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t=0} = 0.$$

Свій максимум u досягає на $(0, 0)$ і $(2\pi, 0)$, але він також досягається в точці $(\pi/2, \pi/2)$.

Співвідношення (2) показують, що якщо функція $u_t(x, 0)$ є від'ємною на AB або якщо $L[u] > 0$ в D то значення u в C строго менше, ніж середнє значення A і B . У цій ситуації ми бачимо, що якщо M позначає максимум u на AB , то $u < M$ в D .

3. Принцип максимуму для рівняння коливання з молодшими членами.

В цьому розділі буде доведено основні результати роботи: принцип максимуму для гіперболічних рівнянь з молодшими членами.

Теорема 1. Нехай $u \in C^2(D)$ і задовольняє

$L[u] \equiv u_{xx} - u_{tt} + u = f(x, t) \geq 0$ в деякій допустимій області D . Нехай також виконуються наступні умови:

$$u(x, 0) \leq M < 0, u_t(x, 0) \leq 0.$$

Тоді $u \leq 0$ в D .

Доведення. Застосуємо теорему Стокса до заданого оператора $L[u]$ і отримаємо:

$$\begin{aligned} \iint_D L[u] dx dt &= \iint_D (u_{xx} - u_{tt} + u) dx dt = \\ &= \iint_D u dx dt + \int_A^B u_t dx + \int_B^C (u_x dt + u_t dx) + \int_C^A (u_x dt + u_t dx). \end{aligned}$$

Проінтегруємо останню рівність вздовж характеристик рівняння: $dx = -dt$ вздовж відрізка BC (перша сім'я характеристик) і $dx = dt$ вздовж CA (друга сім'я характеристик). Отже, отримаємо наступне:

$$\iint_D L[u] dx dt = \iint_D u dx dt + \int_A^B u_t dx - \int_B^C (u_x dt + u_t dx) + \int_C^A (u_x dt + u_t dx),$$

або

$$\iint_D L[u] dx dt = \iint_D u dx dt + \int_A^B u_t dx + u(A) + u(B) - 2u(C).$$

Враховуючи $L[u] \geq 0$ в області D , оцінимо $u(C)$:

$$u(C) \leq \frac{1}{2}[u(A) + u(B)] + \frac{1}{2} \iint_D u dx dt + \frac{1}{2} \int_A^B u_t dx.$$

За умовами теореми $u(x, 0) \leq M < 0$, $u_t(x, 0) \leq 0$, отже, застосовуючи ці умови, отримаємо:

$$u(C) \leq \frac{1}{2}[u(A) + u(B)]. \quad (5)$$

З отриманої нерівності бачимо, що значення u в трикутнику ABC не можуть перевищувати максимального значення u на початковому відрізку прямої AB .

Оскільки точки A та B лежать на прямій $t = 0$, маємо:

$$u(C) \leq 0. \quad (6)$$

Оскільки точка C , через яку було проведено сім'ї характеристик заданого рівняння з області D є довільною, приходимо до результату теореми.

Аналогічний результат має місце і для рівняння коливання струни з молодшими членами першого порядку:

Теорема 2. Нехай $u \in C^2(D)$ і задовольняє

$L[u] \equiv u_{xx} - u_{tt} + u_x = f(x, t) \geq 0$ в деякій допустимій області D . Нехай також виконуються наступні умови:

$$u(x, 0) \leq M < 0, u_t(x, 0) \leq 0.$$

Тоді $u \leq 0$ в D .

Доведення. Застосовуючи теорему Стокса для оператора $L[u] \equiv u_{xx} - u_{tt} + u_x$, отримаємо:

$$\begin{aligned} \iint_D L[u] dx dt &= \iint_D (u_{xx} - u_{tt} + u_x) dx dt = \\ &= \iint_D u_x dx dt + \int_A^B u_t dx + \int_B^C (u_x dt + u_t dx) + \int_C^A (u_x dt + u_t dx). \end{aligned}$$

Застосовуючи, як і в теоремі 1, інтегрування по характеристикам рівняння, проведених через довільну точку $C \in D$ до перетину з «прямою початкових даних», $t=0$, матимемо:

$$\begin{aligned} \iint_D L[u] dx dt &= \iint_D u_x dx dt + \int_A^B u_t dx - \int_B^C (u_x dt + u_t dx) + \int_C^A (u_x dt + u_t dx), \\ \iint_D L[u] dx dt &= \iint_D u_x dx dt + \int_A^B u_t dx + u(A) + u(B) - 2u(C). \end{aligned}$$

За умовами теореми $L[u] \geq 0$, $u(x, 0) \leq M < 0$, $u_t(x, 0) \leq 0$, отже, приходимо до наступної оцінки:

$$u(C) \leq \frac{1}{2}[u(A) + u(B)]$$

З отриманої нерівності бачимо, що значення u в трикутнику ABC не можуть перевищувати максимального значення u на відріжку початкових даних, прямих AB .

Оскільки точки A та B лежать на прямій $t = 0$, маємо:

$$u(C) \leq 0.$$

Оскільки точка $C \in D$ є довільною точкою допустимої області D , приходимо до результату теореми.

4. Висновки

В роботі була розглянута актуальна проблема доведення аналогу принципу максимуму для рівнянь в частинних похідних гіперболічного типу, для яких класичний принцип максимуму не має місця. Враховуючи формулювання принципу максимуму для рівнянь гіперболічного типу попередніх робіт, встановлено аналог принципу максимуму для класичного розв'язку задачі Коші рівняння коливання одновимірної струни з молодшими членами типу амплітуд, а також першого порядку. Доведення спирається на результат, запропонований в роботі [1], і включає в себе метод характеристик, що є природним для рівнянь гіперболічного типу, а також теорему Стокса, оскільки мова йде про класичні розв'язки достатньої гладкості.

Подяки

Робота виконання в рамках залучення молодих вчених (студентів) до виконання держбюджетних тем МОН, номер держреєстрації 0121U109525, а також українсько-німецького проекту A131968 «From Modeling and Analysis to Approximation.»

Список використаної літератури:

1. Protter M. Maximum principle in Differential Equations / M. Protter, H. Weinberger // Springer-Verlag New York. Inc. – 1984. – 261 p. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-5282-5>
2. Mawhin J. Maximum principle for bounded solutions of the telegraph equation in 2- and 3-dim. and applications / J. Mawhin, R. Ortega, A. Robles-Perez // Journal of Differential Equations. – 2005. – Vol. 208, No. 1. – pp. 42–63. – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/S1631-073X\(02\)02406-8](https://doi.org/10.1016/S1631-073X(02)02406-8)
3. Agmon S. A maximum principle for a class of hyperbolic equations and applications to equations of mixed elliptic-hyperbolic type / S. Agmon, L. Nirenberg, M. Protter // Comm. on Pure and Applied Math. – 1953. – Vol. 6, No. 4. – pp. 455–470. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/cpa.3160060402>
4. Clain S. Finite volume maximum principle for hyperbolic scalar problems / S. Clain // SIAM J. Num. Anal. – 2013. – Vol. 51, No. 1. – pp. 467–490. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1137/110854278>
5. Wang F. Existence and multiplicity results of positive doubly periodic solutions for nonlinear telegraph system / F. Wang, Y. An // Journal of Math. Analysis and Application. – 2009. – Vol. 349, No. 1. – pp. 30–42. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2008.08.003>
6. Li Y. Positive doubly periodic solutions of nonlinear telegraph equations / Y. Li // Nonlinear Analysis. – 2003. – Vol. 30, No. 3. – pp. 1104–1125. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3934/era.2022059>
7. Duffin R. J. The maximum principle and biharmonic functions / R. J. Duffin // Journal of Math. Anal. and Applic. – 1961. – pp. 399–405. – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/0022-247X\(61\)90066-X](https://doi.org/10.1016/0022-247X(61)90066-X)
8. Protter M. H. A maximum principle for hyperbolic equations in a neighborhood of an initial line / M. H. Protter // Trans. of the Amer. Math. Soc. – 1958. – Vol. 87, No. 1. – pp. 119–129. – Режим доступу: <https://www.ams.org/journals/tran/1958-087-01/S0002-9947-1958-0097611-2/S0002-9947-1958-0097611-2.pdf>
9. Sather D. A maximum property of Cauchy's problem for the wave operator / D. A Sather // Arch. For Rat. Mech. and Anal. – 1966. – Vol. 19, No. 1. – pp. 303–309. – Режим доступу: <https://msp.org/pjm/1966/19-1/pjm-v19-n1-p12-s.pdf>
10. Sather D. Maximum and monotonicity properties of initial-boundary value problems for hyperbolic equations / D. Sather // Pacific J. of Math. – 1966. – Vol. 19, No. 1. – pp. 141–157. – Режим доступу: <https://msp.org/pjm/1966/19-1/pjm-v19-n1-p12-s.pdf>
11. Sousa R. (2019). The hyperbolic maximum principle approach to the construction of generalized convolutions / R. Sousa, M. Guerra, S. Yakubovich // In Special Functions and Analysis of Differential Equations. – 2019. – pp. 119–159 – Режим доступу: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1901.10357>
12. Sloss J. M. Maximum principle for the optimal control of a hyperbolic equation in one space dimension, part 1: Theory / J. M. Sloss, I. S. Sadek, Jr. Bruch, S. Adali // Journal of Optimization Theory and Applications. – 1995. – Vol. 87. – pp. 33–45. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1007/BF02192565>

References:

1. Protter M., Weinberger H. (1984). Maximum principle in Differential Equations, *Springer-Verlag New York. Inc.*, 261 p. Retrieved from <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-5282-5>
2. Mawhin, J., Ortega, R., & Robles-Pérez, A. M. (2005). Maximum principles for bounded solutions of the telegraph equation in space dimensions two and three and applications. *Journal of Differential Equations*, 208(1), 42-63. [https://doi.org/10.1016/S1631-073X\(02\)02406-8](https://doi.org/10.1016/S1631-073X(02)02406-8)
3. Agmon S., Nirenberg L., Protter M.H. (1953). A maximum principle for a class of hyperbolic equations and applications to equations of mixed elliptic-hyperbolic type, *Comm. on Pure and Applied Math.*, 6(4), pp. 455–470. Retrieved from <https://doi.org/10.1002/cpa.3160060402>
4. Clain, S. (2013). Finite volume maximum principle for hyperbolic scalar problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 51(1), 467-490. Retrieved from <https://doi.org/10.1137/110854278>
5. Wang, F., & An, Y. (2009). Existence and multiplicity results of positive doubly periodic solutions for nonlinear telegraph system. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 349(1), 30-42. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2008.08.003>
6. Li, Y. (2003). Positive doubly periodic solutions of nonlinear telegraph equations. *Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications*, 5(3), 245-254. Retrieved from <https://doi.org/10.3934/era.2022059>
7. Duffin, R. J. (1961). The maximum principle and biharmonic functions. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 3(3), 399-405. Retrieved from [https://doi.org/10.1016/0022-247X\(61\)90066-X](https://doi.org/10.1016/0022-247X(61)90066-X)
8. Protter, M. H. (1958). A maximum principle for hyperbolic equations in a neighborhood of an initial line. *Transactions of the American Mathematical Society*, 87(1), 119-129. Retrieved from <https://www.ams.org/journals/tran/1958-087-01/S0002-9947-1958-0097611-2/S0002-9947-1958-0097611-2.pdf>
9. Sather, D. (1966). A maximum property of Cauchy's problem for the wave operator. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 21(4), 303-309. Retrieved from <https://msp.org/pjm/1966/19-1/pjm-v19-n1-p12-s.pdf>
10. Sather, D. (1966). Maximum and monotonicity properties of initial boundary value problems for hyperbolic equations. *Pacific Journal of Mathematics*, 19(1), 141-157. Retrieved from <https://msp.org/pjm/1966/19-1/pjm-v19-n1-p12-s.pdf>
11. Sousa, R., Guerra, M., & Yakubovich, S. (2019). The hyperbolic maximum principle approach to the construction of generalized convolutions. In *Special Functions and Analysis of Differential Equations* (pp. 119-159). Chapman and Hall/CRC. Retrieved from <https://doi.org/10.48550/arXiv.1901.10357>
12. Sloss, J. M., Sadek, I. S., Bruch, J. C., & Adali, S. (1995). Maximum principle for the optimal control of a hyperbolic equation in one space dimension, part 1: theory. *Journal of optimization theory and applications*, 87, 33-45. Retrieved from <https://doi.org/10.1007/BF02192565>

Yu. A. Andreieva

Master of mathematics,
Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine,
jandreieva7@gmail.com

K. O. Buryachenko

Candidate physical and mathematical sciences, Docent,
Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine
k.buriachenko@donnu.edu.ua

ANALOG OF MAXIMUM PRINCIPLE FOR THE WAVE PROCESSES

The maximum principle for partial differential equations plays essential role in various applicatins. There is usually a natural physical interpretation of the maximum principle in those problems in differential equations that arise in physics. In such situations the maximum principle helps us apply physical intuition to mathematical models. Consequently, anyone learning about the maximum principle becomes acquainted with the classically important partial differential equations and, at the same time, discovers the reasons for their importance. The proofs required to establish the maximum principle are extremely elementary. By concentrating on those applications which can be derived from the maximum principle by elementary methods, such as characteristics methods and Stock's theorem, Green's theorem, integrating by characteristics and others. The maximum principle enables us to obtain information about solutions of differential equations without any explicit knowledge of the solutions themselves. In particular, the maximum principle is a useful tool in the approximation of solutions, a subject of great interest to many scientists. For the cases of elliptic and parabolic partial differential equations maximum principle is well-known fact, at the same time, in the case of hyperbolic equations classical formulation of maximum principle is not valid.

This paper deals with maximum principle for second order hyperbolic equatins this lower terms. The forms that these principles take reflect the structure of properly posed problems for hyperbolic equations. Both the statements of the theorems and the methods of proof for hyperbolic operators, presented in this paper are quite different from those for elliptic and parabolic operators. In particular, the role of characteristic curves and surfaces becomes evident in the hyperbolic case. The maximum principle occurs in so many places and in such varied forms that we have found it impossible to discuss some topics which we had originally hoped to treat. For example, the maximum principle for finite difference operators is omitted entirely. The mains results of the paper are theorems on maximum principle for second order hyperbolic equations, lower terms of which contain amplitudes and first-order derivatives.

Keywords: method of characteristics, hyperbolic partial differential equations of the second order, wave equation, vibrating string equation, maximum principle, classical solutions, Stock's theorem.

Одержано редакцією 27.06.2022

Прийнято до друку 04.07.2022

ORCID: 0000-0001-8267-8365

Д. І. Коломієць

Аспірант кафедри фізики, ННІ ІНФОТЕХ,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,
denyskolomiiets95@gmail.com

ORCID: 0000-0001-5885-2079

Є. В. Татарчук

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент фізики,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,
etatar@ukr.net

DOI: 10.31651/2076-5851-2022-70-76

PACS: 66.30.-h, 68.35.Fx, 81.05.Bx,
64.70.kd, 66.30.Ny

ВПЛИВ ЗОВНІШНЬОГО ТИСКУ НА КІНЕТИКУ РОСТУ ФАЗИ У СИСТЕМІ Cu-Sn-Cu

Експериментально досліджено кінетику росту фаз у системі Cu-Sn-Cu при ізотермічному відпалі (250°C), при атмосферному тиску і з примусовим зовнішнім тиском. Обраховано товщину фаз Cu₃Sn + Cu₆Sn₅ через певні проміжки часу відпалу системи із примусовим зовнішнім тиском і без нього. На основі отриманих даних представлено графіки залежності товщини фаз від часу відпалу. Показано, що зовнішній тиск значно сповільнює ріст фаз у даній системі.

Ключові слова: реакційна дифузія, бінарна система, рідкофазні реакції міді і олова, кінетика росту.

1. Вступ

Незважаючи на стрімкий розвиток та мініатюризацію елементної бази сучасної електроніки, реалізація електричних з'єднань компонентів відбувається за рахунок використання давно відомого методу паяних з'єднань, основними компонентами яких залишаються мідь та олово. При створенні паяного з'єднання відбувається реакційна дифузія між міддю та рідким оловом у результаті чого на їх контакт утворюються дві фази Cu₆Sn₅ та Cu₃Sn. У процесі росту фази Cu₃Sn в ній формуються пори, які можуть впливати на механічні та електричні властивості контакту і слугувати місцями зародження дефектів, що спричиняють вихід з ладу саме електричних з'єднань елементів схеми. Тому дослідженням реакційної дифузії у системі Cu-Sn та проблемі утворення пор присвячено багато публікацій експериментального та теоретичного характеру [1-5].

На процес росту фази Cu₃Sn та утворення в ній пор впливає багато факторів, наприклад розмір зерен підложки міді [6], методика обробка підложки [5]. В даній роботі проведено експериментальне дослідження впливу зовнішнього тиску на пригнічення росту фаз Cu₃Sn+Cu₆Sn₅ в системі Cu-Sn-Cu.

2. Методика експериментальних досліджень

Для експериментального дослідження кінетики росту фази у системі Cu-Sn-Cu було виготовлено дві мідні пластинки однакових розмірів з ретельно підготовленими поверхнями, які були піддані механічній та хімічній обробці. Між пластинок міді був нанесений прошарок олова. Для забезпечення фіксованої товщини шару Sn у зразках, були встановлені обмежувачі з двох сторін пластинок.

Ці обмежувачі гарантували однакову товщину Sn (15μ) у зразках. Після розпилювання матеріалу, отримані два однакових зразки, з якими проводили подальші дослідження (рис.1). Торці обох зразків також були піддані механічній та хімічній обробці, щоб забезпечити однакові умови для проведення експерименту.

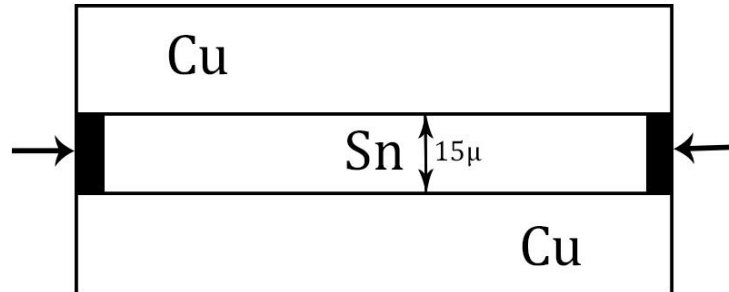


Рис. 1. Виготовлена система Cu-Sn-Cu
Fig. 1. The Cu-Sn-Cu system was produced.

В експерименті було використано два зразки: один з них знаходився при атмосферному тиску, а другий був стиснутий з усіх боків. Для забезпечення рівномірного тиску на систему з усіх боків, зразок був стиснутий металевими стержнями та пластинами (рис.2) з допомогою гідравлічного пресу (тиск 150кгс/см^2). Постійний тиск фіксувався спеціально виготовленими затискачами. Дана процедура була застосована з метою вивчення впливу зовнішнього тиску на кінетику росту фази у системі Cu-Sn-Cu.

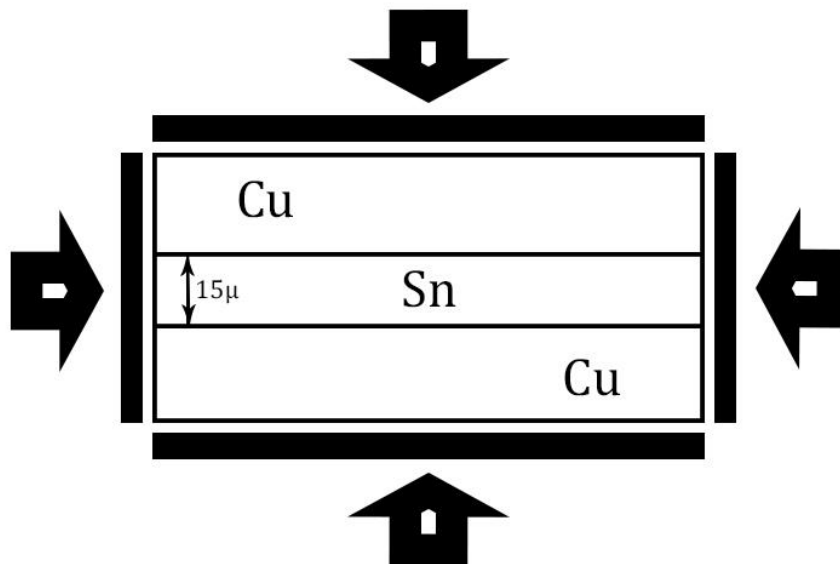


Рис. 2. Зразок Cu-Sn-Cu у вигляді сандвіча, затиснений у струбцині.
Fig. 2. A sample of Cu-Sn-Cu in the form of a sandwich, clamped in a clamp.

Після підготовки експериментальних зразків, проведення механічної та хімічної обробки, було розпочато відпал зразків для вивчення кінетики росту фази у системі Cu-Sn-Cu.

Дані експериментально досліджувані зразки певний час піддавалися одночасному ізотермічному відпалу при температурі 250°C. Через певні інтервали часу (2 години) обидва зразки діставали з печі та проводили знімки торцевої поверхні. Загальний час відпалу становив 12 годин. Для прикладу знімки (з однаковим збільшенням) зразків після ізотермічного відпалу протягом 6 годин під тиском і без нього що зображено на (рис.3-4).

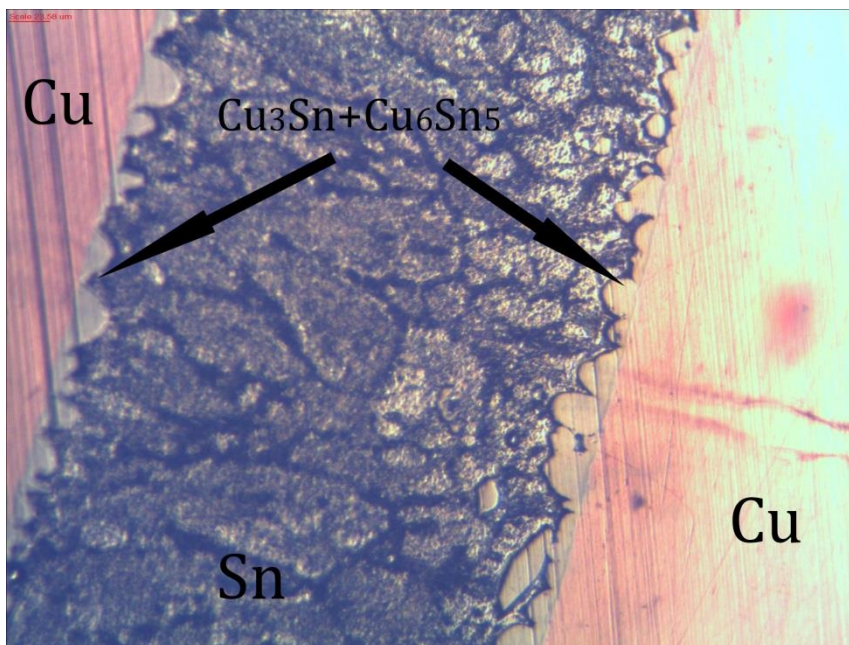


Рис. 3. Зразок після 6 годин відпалу без впливу зовнішнього тиску.

Fig. 3. The sample after 6 hours of annealing without the influence of external pressure.

Проведено цикл експериментів для встановлення впливу температури на процес утворення нанопоясів та побудовані відповідні залежності водневих показників та в'язкості досліджуваних суспензій. На рис. 4-10 представлені результати впливу температури та інтенсивності перемішування на водневий показник та в'язкість суспензії у процесі синтезу.

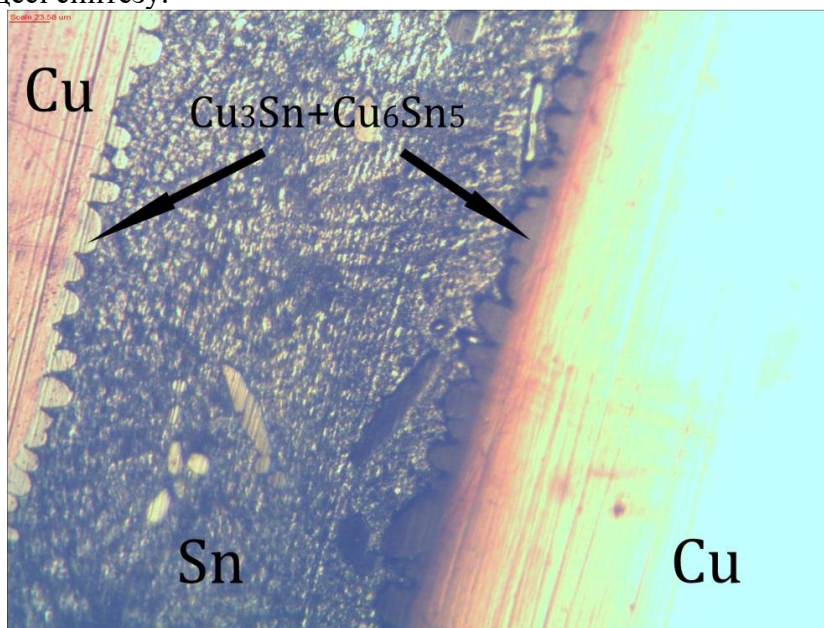


Рис. 4. Зразок після 6 годин відпалу під впливом зовнішнього тиску

Fig. 4. Sample after 6 hours of annealing under external pressure

Через кожні 2 години вимірювалась загальна товщина фаз $\text{Cu}_3\text{Sn} + \text{Cu}_6\text{Sn}_5$. Для вимірювання товщини фаз був застосований металографічний мікроскоп ПМ, а обробку знімків та вимірювання товщини вище вказаних фаз здійснювали з використанням програми Photoshop.

Навіть без вимірювання товщини фаз, візуально (рис.3-4) видно, що в зразках які знаходились під зовнішнім додатковим тиском (150кгс/см^2) товщина фаз менша ніж у зразках під атмосферним тиском. Після завершення кожного відпалу, проводилась ретельна обробка зразків [7] та обрахунок товщини фаз.

Для візуалізації залежності росту фази від умов відпалу із отриманих експериментальних даних було побудовано графік.

На графіку (зразок 1) представлений досліджуваний зразок, який відпалювався без зовнішнього тиску, тоді як на графіку (зразок 2) представлений досліджуваний зразок, який відпалювався при стисненні з усіх сторін (рис. 5). Графік демонструє, як змінюється ріст фази в залежності від умов відпалу.

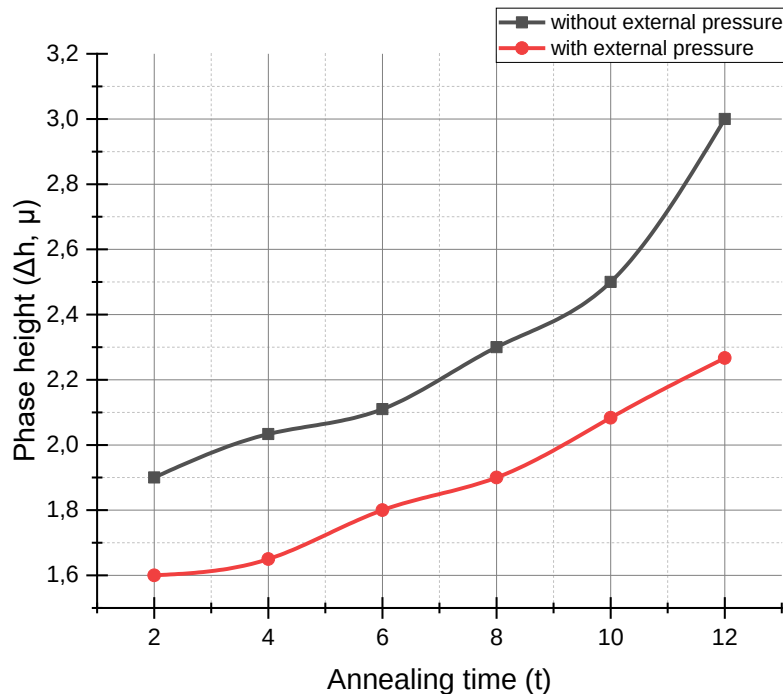


Рис. 5. Графік залежностей росту фаз від часу відпалу

Fig. 5. Graph of phase growth dependences on annealing time.

Лінія на графіку що відповідає відпалу системі під зовнішнім тиском знаходиться нижче ніж лінія, що відповідає відпалу при атмосферному тиску. Отже це говорить про те, що товщина фаз $\text{Cu}_3\text{Sn} + \text{Cu}_6\text{Sn}_5$ у зразку з додатковим зовнішнім тиском менші ніж без тиску. Також з графіка видно, що в цілому товщина фаз при атмосферному відпалі росте дещо швидше. Оскільки фази при відпалі із зовнішнім тиском менші за розміром, і ростуть повільніше при аналогічних умовах, то логічно передбачити що і пор, які в них утворюються в цілому буде менше. Таким чином, дана методика може розглядатись як один із способів пригнічення утворення пор у системі мідь-олово.

3. Висновки

1. При дослідженні кінетики реакційної дифузії в системі Cu-Sn-Cu при ізотермічному відпалі (250 °C) розглядався один із варіантів сповільнення росту фаз і відповідно пор, як негативного явища.

2. Експериментально, з допомогою порівняльного аналізу, встановлено, що зовнішній тиск значно сповільнює ріст фаз у системі Cu-Sn-Cu (результати досліджень приведені на графіках).

3. Отримані результати говорять про те, що даний метод (додатковий зовнішній тиск) можна розглядати як один із способів пригнічення утворення пор у системі мідь-олово.

Список використаної літератури:

1. S.J. Wangl and C.Y. Liu. Study of Interaction between Cu-Sn and Ni-Sn Interfacial Reactions by Ni-Sn3.5Ag-Cu Sandwich Structure/ S.J. Wangl and C.Y. Liu. // *Journal of electronic materials*. –2003. –V. 32.– P. 1303–1309. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1007/s11664-003-0027-0>
2. V.A. Baheti. Bifurcation of the Kirkendall marker plane and the role of Ni and other impurities on the growth of Kirkendall voids in the Cu–Sn system/ V.A. Baheti, S.Kashyap, P. Kumar, K. Chattopadhyay, A. Paul. // *Acta Materialia*. –2017. –V. 131.– P. 260-270. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.03.068>
3. V.V. Turlo. Model of phase separation and of morphology evolution in two-phase alloy / V.V. Turlo , A.M. Gusak, K.N. Tu // *Philosophical Magazine*. –2012. –V. 93 .– P. 1–13. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/14786435.2012.747011>
4. Y. Chun. Effect of deposit thickness during electroplating on Kirkendall voiding at Sn/Cu joints / Chun Yu , Yang Yang, Jieshi Chen , Jijin Xu , Junmei Chen, Hao Lu // *Materials Letters*. –2014. –V. 128 .– P. 9–11. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2014.04.091>
5. V.V. Morozovych. Influence of copper pretreatment on the phase and pore formations in the solid phase reactions of copper with tin / Morozovych, V. V., Honda, A. R., Lyashenko, Y. O., Korol, Y. D., Liashenko, O. Y., Cserhati, C.,Gusak, A. M. // *Металлофизика и новейшие технологии*. –2018. –V. 40 .– P. 1649-1673. – Режим доступу: <https://doi.org/10.15407/mfint.40.12.1649>
6. Є. В. Татарчук. Вплив розміру зерен міді на швидкість росту прошарку проміжних фаз у дифузійній парі Cu-Sn / Є. В. Татарчук І. Г. Галат // *Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки»* . –2015. –V. 16 .– P. 64-71. – Режим доступу: <https://phys-ejournal.cdu.edu.ua/article/view/681>
7. Лахтін Ю. М. Основи металознавства./ Ю. М. Лахтін // *Металургія»* . –1988.– P. 1-320. – Режим доступу: <https://booktechosnovy-metallovedeniya-1988-yu-m-lahtin.html>

References:

1. S.J. Wangl and C.Y. Liu. (2003) Study of Interaction between Cu-Sn and Ni-Sn Interfacial Reactions by Ni-Sn3.5Ag-Cu Sandwich Structure. *Journal of Electronic materials*, 32, 1303–1309. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1007/s11664-003-0027-0>
2. Varun A Baheti, Sanjay Kashyap, Praveen Kumar, Kamanio Chattopadhyay and Alope Paul. (2017). Bifurcation of the Kirkendall marker plane and the role of Ni and other impurities on the growth of Kirkendall voids in the Cu–Sn system. *Acta Materialia* ,131, 260-270. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.03.068>

3. V.V. Turlo , A.M. Gusak & K.N. Tu. (2012). Model of phase separation and of morphology evolution in two-phase alloy. *Philosophical Magazine*, 93,1–13. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1080/14786435.2012.747011>
4. Chun Yu , Yang Yang, Jieshi Chen , Jijin Xu , Junmei Chen, Hao Lu. (2014). Effect of deposit thickness during electroplating on Kirkendall voiding at Sn/Cu joints. *Materials Letters*, 128, 9–11. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2014.04.091>
5. Morozovych, V. V., Honda, A. R., Lyashenko, Y. O., Korol, Y. D., Liashenko, O. Y., Cserhati, C., & Gusak, A. M. (2018). Influence of copper pretreatment on the phase and pore formations in the solid phase reactions of copper with tin. *Metal Physics and Latest Technologies*, 40, 1649-1673. – Retrieved from: <https://doi.org/10.15407/mfint.40.12.1649>
6. Tatarchuk E. V. (2015) Influence of the size of copper grains on the growth rate of a layer of intermediate phases in a Cu-Sn diffusion pair. *Bulletin of the Cherkasy University. Series "Physical and mathematical sciences"*, 16, 64-71. – Retrieved from: <https://phys-ejournal.cdu.edu.ua/article/view/681>
7. Lakhtin Y.M. (1988) Fundamentals of metal science. *Metallurgy*.1-320. – Retrieved from: <https://booktechosnovy-metallovedeniya-1988-yu-m-lahtin.html>.

D. I. Kolomiets

PhD student of the Department of Physics, The Bohdan Khmelnytsky
National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
denyskolomiets95@gmail.com

E. V. Tatarchuk

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, The Bohdan
Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
etatar@ukr.net

THE INFLUENCE OF EXTERNAL PRESSURE ON THE KINETICS OF PHASE GROWTH IN THE Cu-Sn-Cu SYSTEM

In the conducted study, the kinetics of phase growth in the Cu-Sn-Cu system under conditions of isothermal annealing at a temperature (250°C) were investigated. In addition, the effect of external pressure on the process of growth or inhibition of the phase and the formation of pores was studied. The main goal of the study was to determine the influence of external pressure on the thickness of the Cu₃Sn and Cu₆Sn₅ phase during certain periods of annealing time of the system.

After the experiment, the obtained data were processed and analyzed. The thickness of the Cu₃Sn and Cu₆Sn₅ phases was processed for two test samples: with and without the influence of external pressure. For this purpose, the values of the phase thickness at different stages of system annealing were measured. After the calculation, graphs were drawn that show the dependence of the phase thickness on the annealing time for both systems.

The results of the experiment showed that the external pressure significantly slows down the growth of the Cu₃Sn and Cu₆Sn₅ phases in the studied system. Graphs of changes in phase thickness from annealing time showed a noticeable difference between the studied samples.

This research has an important practical application in the field of materials science and metallurgy. Because during the creation of a soldered joint, reactive diffusion occurs between copper and liquid tin, as a result of which two phases are formed at their contact. In the process of its growth, in turn, pores are formed, which can affect the mechanical and electrical properties of the contact and serve as places for the nucleation of defects, which cause the electrical connections of the circuit elements to fail. That is why the findings can help to improve the technology of making soldered joints, ensuring better quality and their mechanical properties.

Key words: reactive diffusion, binary system, copper/tin state liquid reactions, growth kinetics.

Одержано редакцією 08.09.2022

Прийнято до друку 12.10.2022

ORCID: 0000-0003-0592-0845

А. П. Чиркова
аспірантка,
КПІ ім. Ігоря Сікорського, Київ, Україна
ilcenkoanna777@gmail.com

DOI: 10.31651/2076-5851-2022-77-94

PACS: 47.85.Gj, 07.05.Tr, 05.70.Jk,
88.05.Qr, 44.05.+e, 44.20.+b

ДЕЯКІ ОСОБЛИВОСТІ АЕРОДИНАМІКИ ТА ТЕПЛООБМІНУ ПРИ ПОПЕРЕЧНОМУ ОБТІКАННІ ОДИНОЧНОЇ КОНІЧНОЇ ТРУБИ НА МАЙДАНЧИКУ ТЕС

Димові труби теплових електростанцій - це важливий елемент складної інфраструктури промислового майданчика ТЕС. Проте при розрахунках димовим пубам приділяється не достатньо уваги. В нашій державі більшість димових труб знаходиться в незадовільному стані, що призводить до негативних наслідків для екологічних умов навколишнього середовища та вплив на роботу ТЕС в цілому.

У роботі представлені результати чисельного моделювання аеродинаміки та теплообміну на поверхні конічної димової труби, розташованої на майданчику ТЕС. У роботі використана традиційна для задач данного класу RNG $k-\epsilon$ модель турбулентності. Розглянуті рівномірний і змінний по висоті профіль швидкості вітру, обумовлений інфраструктурою навколишнього середовища (різні типи місцевості) і промислового майданчика ТЕС. Обтікання димової труби має складний характер, з формуванням областей відривної течії та руйнування прикордонного шару. Показано, що розташування труби відносно об'єктів інфраструктури промислового майданчика теплової електростанції відіграє важливу роль у розподілі швидкості, статичного тиску та теплообміну по висоті труби, які мають періодичний характер за висотою як при рівномірному профілі швидкості, так і в області вище за будівлю машинного залу при змінному профілі швидкості набігаючого потоку повітря. Показано, що використання рівняння двомірного обтікання круглого циліндра призводить до значної похибки при розрахунку тепловіддачі на зовнішній поверхні конічної димової труби. Такі результати розрахунків призводять до не точних обчислень та зниження строку експлуатації димових труб теплових електростанцій та руйнування їхньої поверхні. Також невірні розрахунки тепловіддачі димової труби ТЕС призводять до випадіння конденсату в її середині та також призводить до тріщин в конструкції димових труб.

Ключові слова: димова труба, аеродинаміка, теплообмін, коефіцієнт тепловіддачі, профіль швидкості, RNG $k-\epsilon$ модель турбулентності, ANSYS 2020-R1.

Умовні позначення:

w_z – профіль швидкості вітру
 w_0 – середня швидкість набігаючого потоку
 α – коефіцієнт тепловіддачі
 z – відстань від поверхні Землі
 k – коефіцієнт зміни швидкості вітру з висотою
 ТЕС – теплова електростанція
 Машзал – машинний зал

Вступ

Димова труба – важливий елемент складної інфраструктури будь якої теплової електростанції. Її основна задача викид відпрацьованих пічних газів, що є завершальним

етапом виробничого технологічного циклу виробництва теплової та електричної енергії. Димова труба має забезпечити вимоги по допустимій концентрації «шкідливих» продуктів горіння у атмосфері, які жорстко нормуються для охорони навколишнього середовища [1, 2]. У процесі спалювання палива на теплових електростанціях шкідливі гази містять тверді речовини та краплі рідини, що осідають на внутрішній поверхні димової труби та частково виводяться в атмосферу. Основними шкідливими речовинами є діоксид сірки (SO_2) та оксид азоту (NO_x). Ці елементи спричиняють негативний вплив на здоров'я людини при потраплянні в легені та можуть призводити до кислотних дощів і утворенні смогу, що завдає шкоду земельним та біоресурсам [3]. Щоб забезпечити надійну та довготривалу експлуатацію труби, потрібно забезпечити певні вимоги, серед яких обмеження випадіння вологи та шкідливих речовин із продуктів горіння усередині труби. Випадіння вологи призводить до постійної корозії в середині труби, утворенню щілин та тріщин, замерзанню вологи і танення льоду в них, руйнування поверхні та неконтрольованого припливу атмосферного повітря [4]. Проте на жаль більшість димових труб ТЕС знаходяться в незадовільному стані, що призводить до негативних наслідків роботи теплових електростанцій в цілому. Димові труби продовжують експлуатувати, підтримуючи технічний стан поточними та капітальними ремонтами, хоча у значній частині димових труб вже вироблений передбачений термін експлуатації в 50 років.

Для запобігання випаданню вологи в даний час застосовуються різні методи. Серед них можна відмітити використання сорбентів, охолодження димових газів до температури, при якій вода конденсується і може бути відокремлена від газового потоку (теплообмінники або спеціальні конденсаційні системи), використання електростатичних пристроїв, використання фільтрів. Наприклад, у роботі [5] приведено приклад зменшення вологи в димових газах у конденсаційних теплоутилізаторах котельних установок. Ці методи можуть використовуватися окремо або в поєднанні залежно від конкретних умов та вимог електростанції.

Для досягнення меншої кількості шкідливих речовин, що містяться у викидах продуктів горіння, використовують декілька методів. Перший з них – це створення більш досконалого устаткування з очищення, зокрема вискоєфективних електрофільтрів, рукавних фільтрів, систем каталітичної нейтралізації, радіаційно-хімічного знешкодження і таке інше. Другий – це розробка нових екологічно чистих топкових пристроїв, що забезпечують мінімальні викиди за рахунок передових технологій спалювання палив. Найпростіший метод – зниження концентрації продуктів горіння у повітрі до безпечного рівня розсіюванням їх на більшу площу. Наприклад змішуванням підігрітих газів. Так в роботі [6] запропонований розрахунок оптимальних режимів додаткової подачі в основу димової труби закрученого підігрітого потоку повітря для упередження утворення конденсату та мінімізації екологічної шкоди. Інший підхід - це використання якомога вищих димових труб. Це призводить до низки складнощів - із збільшенням висоти зростає швидкісний напір вітру, зростання тиску на конструкції труб та інші, що пов'язані зі стійкістю та надійністю її експлуатації, що було зазначено в роботі [7, 12].

Забезпечення надійного тепловологісного режиму в димовій трубі тісно пов'язане з граничними умовами третього роду на її зовнішній поверхні (коефіцієнти тепловіддачі), які визначаються геометричною формою труби, її розмірами, інфраструктурою ТЕС і навколишнього простору, швидкістю та напрямом вітру, температурою навколишнього простору. Таким чином, зовнішня тепловіддача труби значною мірою визначається особливостями її обтікання та розташування на місцевості. Врахувати все фактори, що впливають, в розрахунках досить важко, тому в проектних

розрахунках використовується класичне рівняння для середньої по периметру циліндра тепловіддачі:

$$\alpha_0 = 7.3 \cdot w_x^{0.66}, \quad (1)$$

яке дає чималі похибки при розрахунках..

Мета справжньої роботи – дослідження аеродинаміки і середнього по периметру теплообміну на зовнішній поверхні одиночної конічної димової труби, розташованої у міській забудові, а також на території муніципальної ТЕС. Аналізуються зимові, літні та осінні умови експлуатації труби. Враховуючи складність експериментального дослідження цієї проблеми, у роботі використано комп'ютерне моделювання, засноване на чисельному розв'язанні диференціальних рівнянь руху та енергії з відповідними граничними умовами.

1. Чутливість сітки і модель турбулентності

На початковому етапі було проведено дослідження з метою визначення оптимальних параметрів сітки для умов тепловіддачі. При аналізі розглянуто зовнішнє обтікання циліндричної труби діаметром 1700 мм, і довжиною 8000 мм, швидкість набігаючого потоку змінювалася від 5 до 25 м/с. Вивчені різні варіанти сіток з параметрами, що впливають на відстань першого вузла від стінки циліндра в діапазоні 0.02–12 мм, а також на швидкість збільшення розмірів елементів по мірі віддалення від області інтересу (Growth rate GR). Сіткові моделі згенеровано з наступними параметрами: orthogonal quality > 0.07 (рекомендовано від 0.05); skewness < 0.9 (рекомендовано до 0.91).

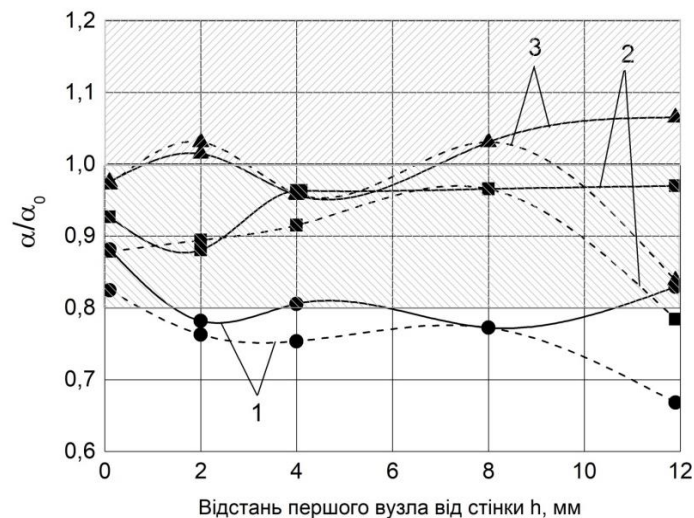


Рис. 1 – Залежність співвідношення α/α_0 від відстані першого вузла до стінки:
(—) Варіант 1, (---) Варіант 2; Швидкість набігаючого потоку: 1 (●) – 5 м/с, 2 (■) – 15 м/с, 3 (▲) – 25 м/с.

Fig. 1 – Dependence of the ratio α/α_0 on the distance of the first node to the wall: (—) Option 1, (---) Option 2; The speed of the oncoming flow: 1 (●) – 5 m/s, 2 (■) – 15 m/s, 3 (▲) – 25 m/s.

З рис. 1 можна помітити, що варіанти сіток 1 та 2 на проміжку 0.02–8 мм є приблизно подібними за результатами моделювання (α – чисельне моделювання; α_0 – розрахунок за рівнянням 1). В результаті аналізу рис.1 визначено, що при відстані першого вузла від стінки циліндра та області, що нас цікавить (Growth rate GR), більше 8 мм варіант 2 демонструє нестабільність, а значення коефіцієнта тепловіддачі, отримані за формулою (1), відхиляються від очікуваних значень більш ніж на 20%. В той же час

при $h > 8$ мм варіант 1 демонструє стабільність розрахунку. В результаті для послідовних розрахунків була обрана область з параметрами сіткової моделі $GR = 1.1$; $h = 8$ мм (кількість вузлів сітки 60109, число елементів 155908). В роботі обрана традиційна для задач даного класу $RNG\ k-\epsilon$ модель, пристінна функція Enhanced Wall Function та алгоритм розв'язку для з'єднання швидкісного тиску в стійких потоках Simplex.

2. Аеродинаміка і теплообмін біля одиночної конічної димової труби: рівномірний профіль швидкості набігаючого потоку

Для дослідження взято одиночну конічну трубу ТЕС, розташовану вертикально на земній поверхні (рис. 2). Параметри труби: висота – 40 м; діаметр в основі – 1.7 м; діаметр в усті – 0.85 м. Комп'ютерна модель розрахована в програмі ANSYS2020-R1 (однорідна область), де за середовище взято повітря. Конусна труба знаходиться на відстані 12 калібрів від входу, відстань до виходу з розрахункової області складає 28 калібрів. На першому етапі дослідження розглядався рівномірний профіль швидкості вітру перед трубою, який задавався на відстані 38.3 м від основи труби. В якості граничних умов використовувалися граничні умови першого роду (температура поверхні труби 100°C). Димова труба умовно розділена на 40 секцій (Zones), кожна із яких становила 1 м.

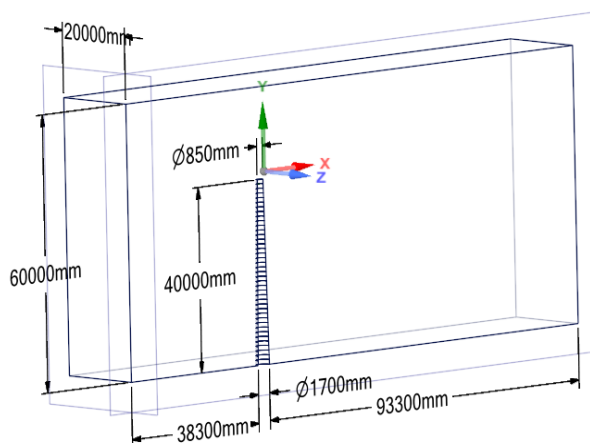


Рис. 2. Геометрична модель: одиночна конічна труба
Fig. 2. Geometrical model: single conical chimney

На рис. 3 показано поле швидкості та температури потоку при поздовжньому перерізі труби. З рисунків видно, що в кормовій області по всій висоті труби зміна поздовжньої швидкості та температури потоку має періодичний характер, який коренним чином відрізняється від вихрової структури в кормовій області при обтіканні безконечного циліндра постійного перерізу. На рис. 4 показано стовпчикову діаграму періодичної зміни по висоті конічної труби усередненої по кутовій координаті коефіцієнта тепловіддачі. Максимальне значення коефіцієнта тепловіддачі знаходиться в Zone (21-22) і в вихідній частині труби Zone (39-40). Періодичність коефіцієнта тепловіддачі в кормовій зоні добре видно на рис. 5.

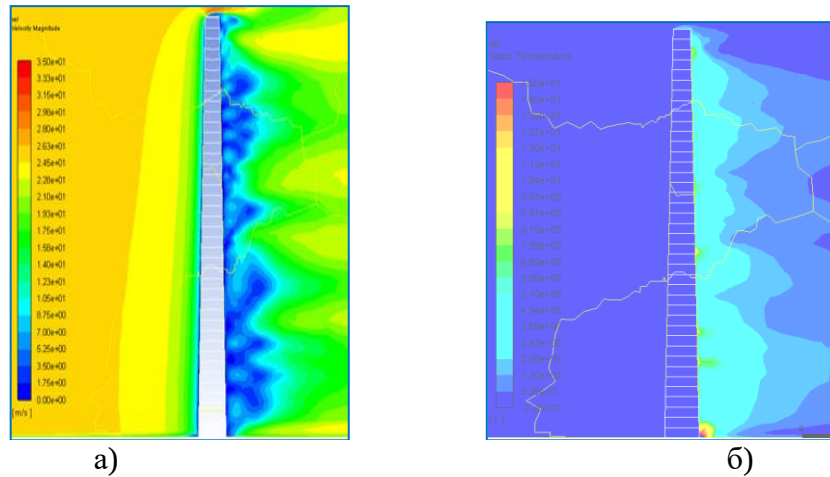


Рис. 3 – Поле швидкості (а) та температури (б) повітря при обтіканні одиночної конічної труби. Рівномірний профіль швидкості набігаючого потоку. Швидкість набігаючого потоку 25 м/с

Fig. 3 – Velocity (a) and temperature (b) field of air flowing around a single conical pipe. A uniform velocity profile of the oncoming flow. The speed of the oncoming stream is 25 m/s

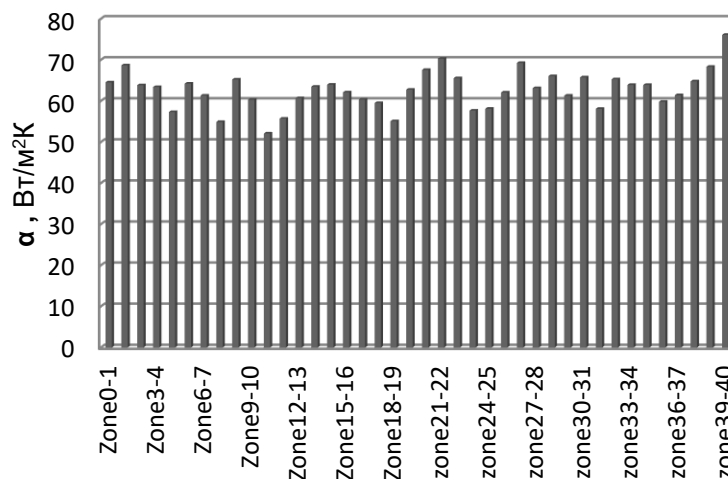


Рис. 4 – Зміна коефіцієнта тепловіддачі для 40 секцій по висоті конічної труби. Рівномірний профіль швидкості набігаючого потоку. Швидкість набігаючого потоку 25 м/с

Fig. 4 – Change of the heat transfer coefficient for 40 sections along the height of the conical chimney. A uniform velocity profile of the oncoming flow. The speed of the oncoming stream is 25 m/s

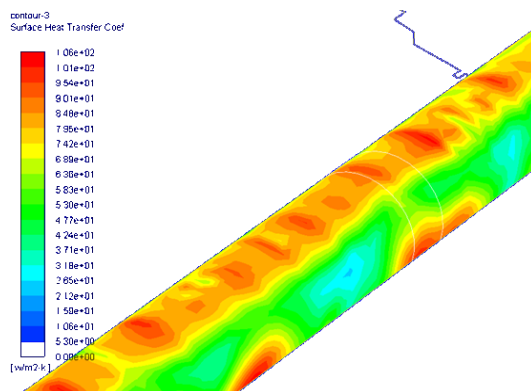


Рис. 5 - Коефіцієнти тепловіддачі на поверхні труби та в Zone (21-22) зокрема. Рівномірний профіль швидкості набігаючого потоку. Швидкість набігаючого потоку 25 м/с

Fig. 5 - Heat transfer coefficients on the chimney surface and in Zone (21-22) in particular. A uniform velocity profile of the oncoming flow. The speed of the oncoming stream is 25 m/s

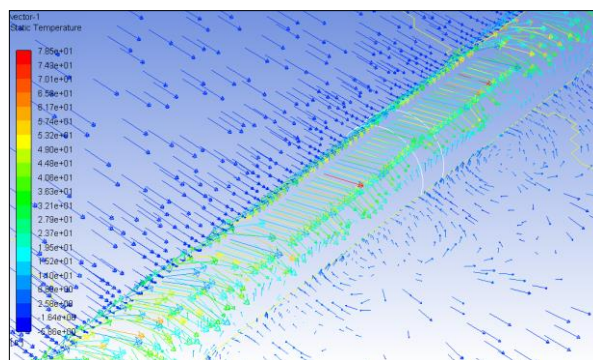


Рис. 6 – Вектори швидкості повітря при обтіканні конічної труби та в Zone (21-22) зокрема. Рівномірний профіль швидкості набігаючого потоку. Швидкість набігаючого потоку 25 м/с

Fig. 6 – Air velocity vectors when flowing around a conical chimney and in Zone (21-22) in particular. A uniform velocity profile of the oncoming flow. The speed of the oncoming stream is 25 m/s

Щоб пояснити розподіл коефіцієнтів тепловіддачі на рис. 6 наведено вектори швидкості руху повітря при поперечному обтіканні конічної труби. За конусною трубою виникають періодичні зони циркуляції, які відповідають за теплообмін за «точкою відриву». Інтенсивність циркуляції в таких зонах змінюється від застійної – коли потік рухається переважно вздовж циліндру, слабо перемішуючись з основним потоком, до зворотної циркуляції. Результати, представлені на рис. 7, показують, що середній по висоті конічної труби коефіцієнт тепловіддачі відповідає результатам розрахунку для круглого нескінченного циліндра, такі особливості вихрової структури в кормовій зоні і форма труби слабо впливають на середній теплообмін.

Статичний тиск по висоті труби також демонструє періодичну зміну по висоті труби в зоні відриву (рис. 8). При аналізі виявлено зони зниженого тиску, зокрема в Zone (21-22) та Zone (39-40), які характеризуються високими значеннями коефіцієнта тепловіддачі.

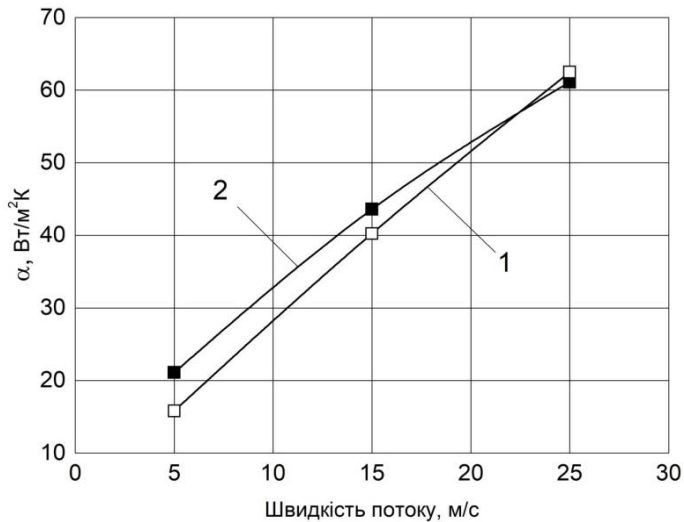


Рис. 7

Рис 7 – Середній по висоті труби коефіцієнт тепловіддачі від середньої швидкості набігаючого потоку: 1 – Розрахунок за рівнянням (1); 2 – Результати моделювання

Fig. 7 – The average heat transfer coefficient along the height of the chimney from the average velocity of the incoming flow: 1 – Calculation according to equation (1); 2 – Simulation results

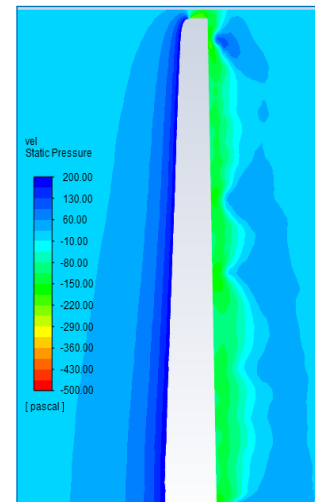


Рис. 8

Рис.8 – Статичний тиск по висоті конічної труби. Швидкість набігаючого потоку 25 м/с

Fig. 8 – Static pressure along the height of the conical chimney. The speed of the oncoming stream is 25 m/s

Таким чином, основною особливістю обтікання конічної димової труби є періодичний характер зміни локальних значень швидкості, температури та статичного тиску за висотою труби у її кормовій ділянці. Це пов'язано з умовами обтікання конічної труби і нульовими граничними умовами на поверхні Землі. Такий характер вихрової структури виявлено вперше, що корінним чином відрізняється від вихрової структури потоку в кормовій області безкінечного круглого циліндра постійного перерізу при поперечному обтіканні [8, 9].

3. Аеродинаміка та теплообмін біля одиночної конічної димової труби: вплив інфраструктури навколишнього середовища (типа місцевості)

При дослідженні використовувалася одиночна конічна труба, розташована на земній поверхні (рис. 2). В якості граничних умов для швидкості вітру біля поверхні Землі використано профіль, який рекомендується в роботі [10]:

$$w_z = w_0 \cdot k(z), \quad (2)$$

де w_z – швидкість на висоті z від поверхні, w_0 – середня швидкість набігаючого потоку, $k(z)$ – коефіцієнт, що враховує зміну швидкості вітру з висотою z і розраховується за формулою:

$$k(z) = k_{10} \cdot \left(\frac{z}{10}\right)^a. \quad (3)$$

Значення параметрів k_{10} і a підбираються виходячи з типу навколишнього середовища [4]. В роботах [10, 13] розглянуто три типи навколишнього середовища (місцевості):

Тип А: Відкриті узбережжя морів, озер і водосховищ, сільські місцевості, в тому числі з будівлями висотою менше 10 м, пустелі, степи, лісостепу, тундра ($k_{10} = 1.0$; $a = 0.30$).

Тип В: Міські території, лісові масиви та інші місцевості, рівномірно покриті перешкодами висотою більше 10 м ($k_{10} = 0.65$; $a = 0.4$).

Тип С: Міські райони з щільною забудовою будинками заввишки більше 25 м ($k_{10} = 0.4$; $a = 0.50$).

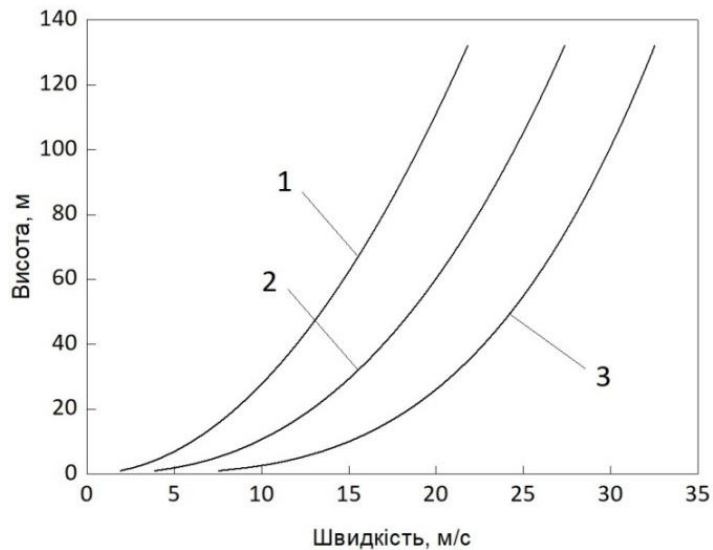


Рис. 9 – Профіль швидкості вітру для різних типів навколишнього середовища. 1 – тип місцевості А; 2 – тип В; 3 – тип С. Середня швидкість вітру 10 м/с

Fig. 9 – Wind speed profile for different types of environment. 1 – terrain type A; 2 – type B; 3 – type C. The average wind speed is 10 m/s

З рис. 9 випливає, що профілі швидкості вітру для різних типів місцевості виявляють нелінійний характер. При проведенні розрахунків профіль швидкості був визначений на відстані 38 300 мм від основи труби, як показано на рис. 1.

На рис. 10 показано середнє по висоті труби коефіцієнти тепловіддачі для різних значень швидкості вітру. З відси слідує, що тип місцевості має значний вплив на величину коефіцієнта тепловіддачі. Це підтверджує необхідність враховувати тип місцевості та профіль швидкості вітру перед трубою при оцінці тепловіддачі біля конічної труби.

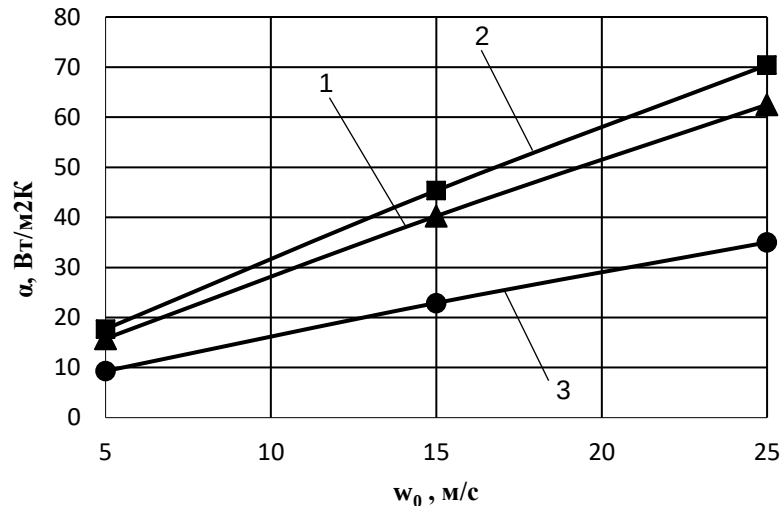


Рис. 10 – Середній по висоті конічної димової труби коефіцієнт тепловіддачі: 1 – Рівномірний профіль швидкості, 2 – Тип місцевості А, 3 – Тип місцевості С.

Fig. 10 – The average height of the conical chimney heat transfer coefficient: 1 – Uniform speed profile, 2 – Terrain type A, 3 – Terrain type C.

4. Аеродинаміка та теплообмін біля димової труби ТЕС: вплив інфраструктури навколишнього середовища ТЕС

Теплова електростанція (ТЕС) – це комплекс енергетичних установок, обладнання та апаратури, що призначені для перетворення палива на електричну та теплову енергію. Зазвичай на промисловому майданчику ТЕС розташовані: головний корпус; мазутне та оливне господарства; корпус подрібнення палива; будівлі підсобних виробництв; пікова водогрійна котельня, градирні; димові труби; газорегулюючий пункт, очисні споруди стічних вод, насосні станції циркуляційного, протипожежного та питного водопостачання та інші об'єкти [11].

Враховуючи основні складові, було створено спрощену 3D-модель для дослідження, до її складу входять (рис. 11): машинний зал, підстанція, адміністративна будівля, склад та дві градирні. Розмір майданчика ТЕС з Півдня на Північ – 295 м, зі Сходу на Захід – 247 м. Димова труба має діаметр в основі $D = 15$ м, діаметр в усті $d = 7.5$ м (конусність 0.625), висота – 120 м. Димова труба розташована несиметрично відносно будівлі машинного залу.

Сіткова модель інфраструктури ТЕС представлена на рис. 11, кількість вузлів сітки – 1 137 781, число елементів – 4 741 859, мінімальна ортогональна якість – 0.1, максимальний перекіс – 0.89. В розрахунках використовувалась RNG k - ϵ модель турбулентності. Густина повітря не залежна від температури на вході в розрахунковий об'єм, силами тяжіння знехтувано. Температура поверхні труби задавалася постійною та рівною 100°C, швидкість вітру змінювалася w_0 від 5 до 25 м/с.

У роботі [12] вивчено два напрямки вітру, які наведені в таблиці. Розглянуто два сезони експлуатації ТЕС (літо, зима) з різною температурою повітря при середній швидкості вітру 5 м/с. Профіль швидкості на межі майданчика ТЕС ставився відповідно до інфраструктури навколишнього простору навколо майданчика ТЕС (тип місцевості С). Таким чином, приведенні нижче результати для кожного варіанта відображають совместное влияние інфраструктури навколишнього середовища (тіпа місцевості) та майданчика ТЕС.

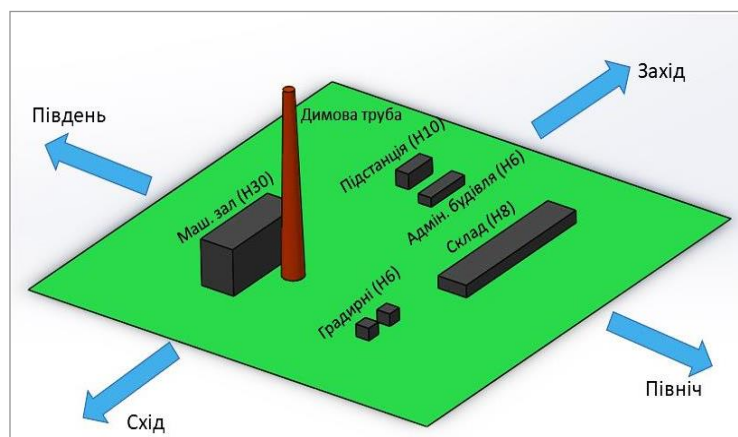


Рис. 11 – Спрощена інфраструктура теплової електростанції (загальний вигляд)
Fig. 11 – Simplified infrastructure of a thermal power plant (general view)

Таблиця 1. Вихідні дані для розрахунку
Table. Output data for calculation

Варіанти розрахунку	Швидкість повітря w_0 , м/с	Температура t , °C	Напрямок повітря	Сезон
Варіант 1	5	-5	Північ – Південь	зима
Варіант 2	5	26	Північ – Південь	літо
Варіант 3	5	-5	Південь – Північ	зима

Варіант 1. Напрямок повітря Північ – Південь (зима)

На рис. 12 зображено поле швидкості в плоскості Z-Y. Так як за димовою трубою розташовується машзал (висота 30 м, ширина 70 м), який є перешкодою для потоку, що обтікає трубу, то обтікання машинного залу має характер тіла, що погано обтікається, з відривом потоку на бічних поверхнях (рис. 13). Несиметричне розташування димової труби щодо центру машзалу приводить до несиметричного обтікання будівлі машзалу. У поперечному напрямку біля труби формується «крилеподібна» структура висотою понад 30 м, яка спадає по мірі віддалення від труби. Як і при обтіканні одиночної труби (рис. 3) в кормовій частині труби спостерігається змінний характер зміни швидкості по висоті труби в кормовій частині в області вище будівлі машинного залу (рис. 12).

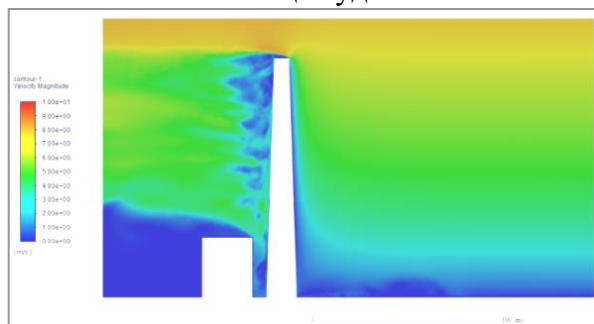


Рис. 12 – Поле повздовжньої швидкості вітру при обтіканні одиночної конічної труби, розташованої перед будівлею машинного залу
Fig. 12 – Longitudinal wind velocity field when flowing around a single conical chimney located in front of the engine room building

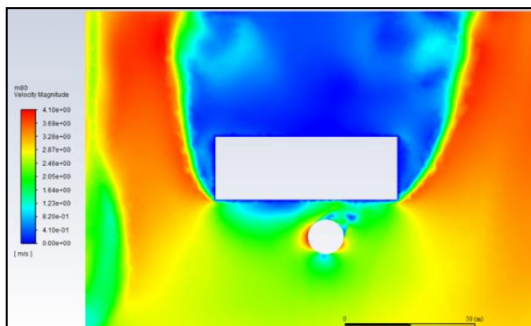
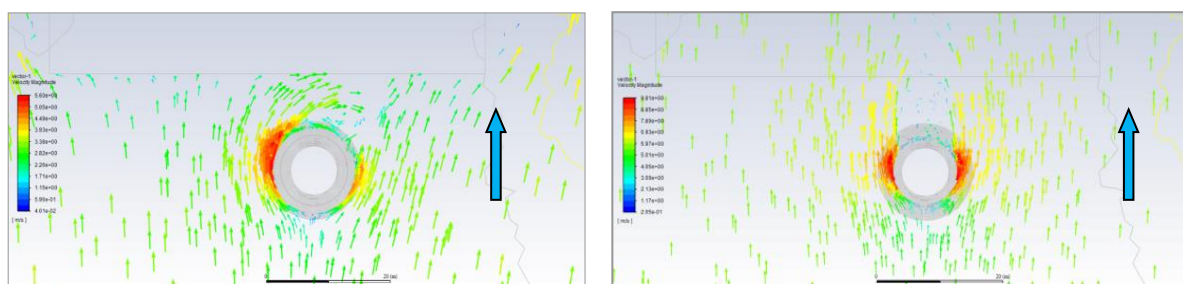


Рис.13 – Поле швидкості при обтіканні одиночної конічної труби на майданчику ТЕС. Висота перерізу 29 м

Fig. 13 – Velocity field when flowing around a single conical chimney at the TPP site. The height of the section is 29 m



а)

б)

Рис. 14 – Аеродинаміка димової труби ТЕС на різній висоті від Землі: а – Висота 29 м; б – Висота 80 м

Fig. 14 – Aerodynamics of a TPP chimney at different heights from the Earth: a – Height 29 m; b - Height 80 m

На рис. 14 наведено векторне поле швидкості. На висоті 29 м в області нижче даху машзала обтікання труби є несиметричним, що обумовлено несиметричним розташуванням труби щодо здания машзала. В області машзала (рис. 14-а) вихрова структура за трубою зміщена вправо, а сам вихор коротший і має більш цілісний і однонаправлений характер (за годинниковою стрілкою). Зона відриву потоку розташована в лівій частині труби (в напрямку потоку), причому її ширина значна за розміром. Вище будівлі машзала (рис. 14-б) гомогенна циркуляція повітря за трубою розбивається на кілька менших за розмірами, але різнонаправлених вихорів с перемінним характером зміни швидкості по висоті труби в кормовій області. Збурення від будівлі поступово згасають і обтікання труби стає симетричним з приблизно однаковою областю відриву потоку зліва та з права. Таким чином, конічна форма труби є основною причиною формування специфічної вихрової структури в кормовій області труби.

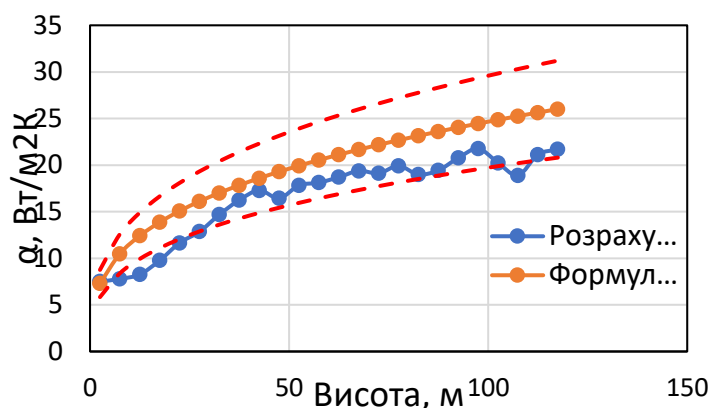


Рис. 15 – Усереднений по кутовій координаті коефіцієнт тепловіддачі: зміна по висоті димової труби. Напрямок повітря Північ – Південь (зима); пунктирна лінія – відхилення $\pm 20\%$ від формули (1)

Fig. 15 – Heat transfer coefficient averaged over the angular coordinate: change in the height of the chimney. Air direction North - South (winter); dashed line – $\pm 20\%$ deviation from formula (1)

Дані по кутовій координаті коефіцієнту тепловіддачі біля димової труби приводяться на рис. 15. Як впливає, по всій висоті труби тепловіддача нижче, ніж розрахована за рівнянням (1). В зоні впливу будівлі машзалу (до висоти 30 м) відхилення від формули (1) складає біля 20% і навіть нижче у бік зменшення. Це зумовлено зниженням швидкості потоку та несиметричним характером обтікання труби. В області 30–80 м тепловіддача приблизно на 10% нижче за розраховану по формулі (1), а в області 80–110 м зменшення тепловіддачі збільшується до 20%.

Варіант 2. Напрямок повітря Північ – Південь (літо)

Це той же напрямок вітру, що і для варіанта 1, але в літній період. Аеродинаміка обтікання димової труби зберігається практично такий же, як і в зимовий період. Різниця в розподіл швидкості потоку біля труби обумовлено тільки через зміну щільності потоку. Незначне зниження тепловіддачі (рис. 16) по висоті труби в літній період в порівнянні з зимовим періодом обумовлений вплив температурного фактора.

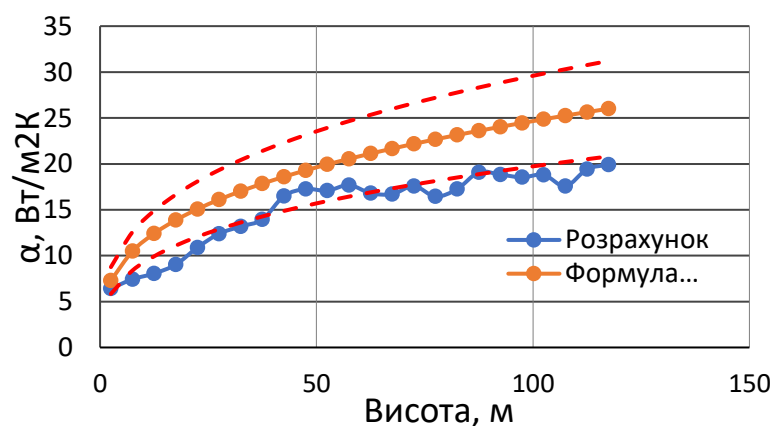


Рис. 16 – Усереднений по кутовій координаті коефіцієнт тепловіддачі: зміна по висоті димової труби. Напрямок повітря Північ – Південь (літо); пунктирна лінія – відхилення $\pm 20\%$ від формули (1)

Fig. 16 – Heat transfer coefficient averaged over the angular coordinate: change in the height of the chimney. Air direction North - South (summer); dashed line – $\pm 20\%$ deviation from formula (1)

Варіант 3. Напрямок повітря Південь - Північ (зима)

Варіант 3 розглядає зворотний напрямок вітру за однакових граничних умов з варіантом 1. Так як будівля машзала висотою 30 м розташовується перед димовою трубою висотою 120 м (рис. 17), то це створює перешкоду потоку, що набігає і «затінення» частини труби будинком. Отже потік, що набігає, огинає будівлю зліва, праворуч і зверху з відривом потоку на бокових поверхнях машзала та зниженою швидкістю потоку за машзалом (близько 0.5 м/с). «Слід» за будівлею машзала несиметричний (рис. 17), що зумовлено несиметричним розташуванням димової труби щодо будівлі машзала та впливом інфраструктури ТЕС.

На рис. 18 наводиться аеродинаміка обтікання машзала та димової труби в перерізі Z-Y. Будівля машзала створює «затінення» потоку, що набігає, і за ним утворюється зона зниженої швидкості. Вище будівлі машзала по висоті труби спостерігаються періодичні коливання швидкості в кормовій ділянці, а гирло труби обтікається зі швидкістю близькою до швидкості набігаючого потоку.

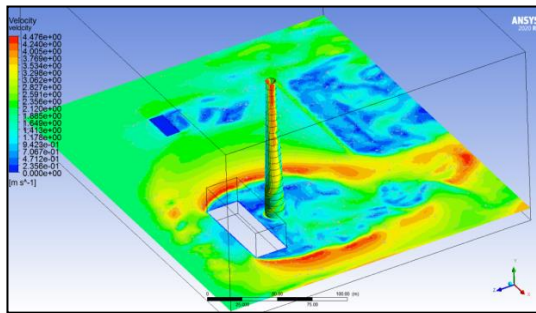


Рис 17 – Аеродинаміка майданчика ТЕС.
Напрямок повітря Південь - Північ.

Висота перерізу 10 м

Fig. 17 – Aerodynamics of the TPP site. The air direction is South - North. The height of the section is 10 m

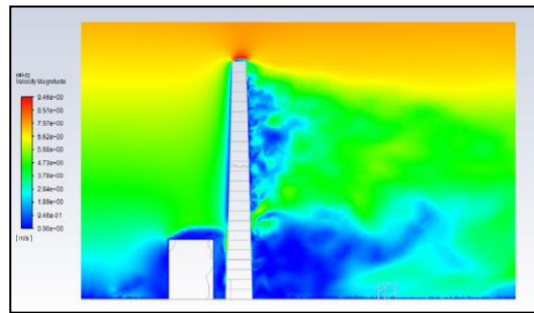


Рис. 18 – Поле швидкості ветру при обтіканні одиночної конічної труби, розташованою на майданчику ТЕС

Fig. 18 – Wind speed field when flowing around a single conical pipe located on the TPP site

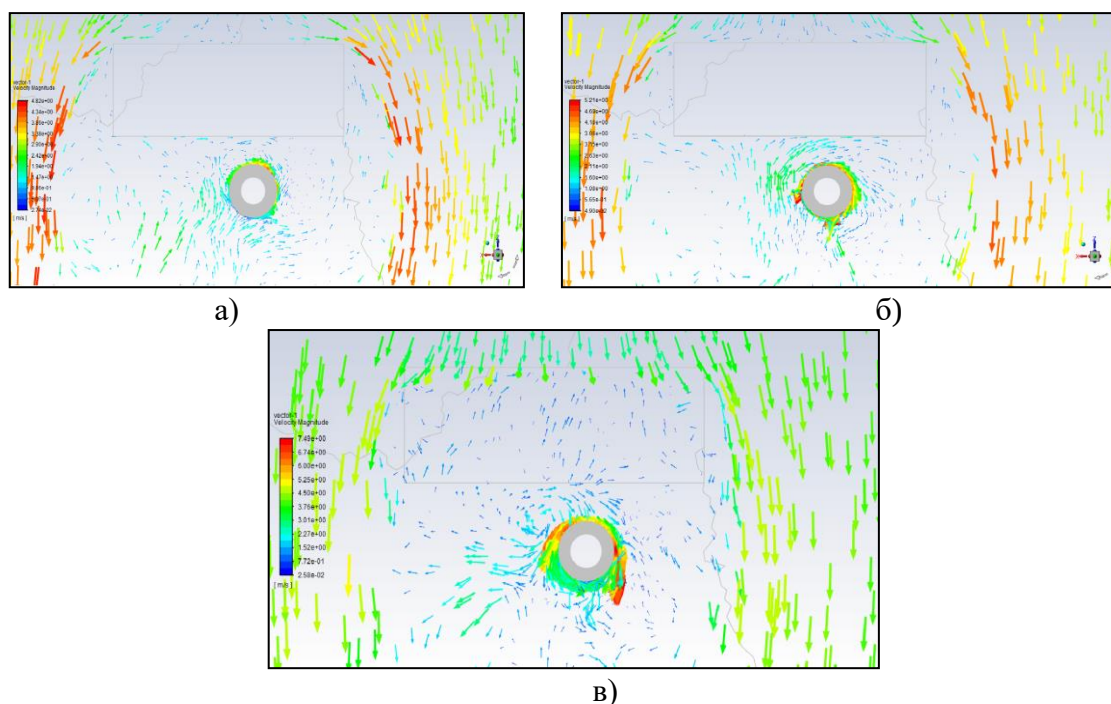


Рис. 19 – Усереднений по кутовій координаті коефіцієнт тепловіддачі: зміна по висоті димової труби. Пунктирна лінія – відхилення $\pm 20\%$ від формули (1); висота перерізу: а – 10 м; б – 20 м, в – 31 м

Fig. 19 – Heat transfer coefficient averaged over the angular coordinate: change in the height of the chimney. Dashed line – $\pm 20\%$ deviation from formula (1); section height: a – 10 m; b – 20 m, c – 31 m

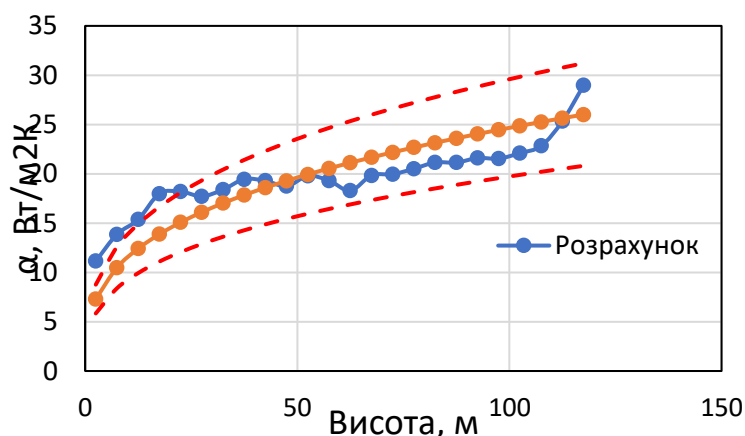


Рис. 20 – Усереднений по кутовій координаті коефіцієнт тепловіддачі по висоті димової труби. Напрямок повітря Південь – Північ (зима); пунктирна лінія – відхилення $\pm 20\%$ від формули (1)

Fig. 20 – Heat transfer coefficient averaged over the angular coordinate along the height of the chimney. Air direction South - North (winter); dashed line – deviation $\pm 20\%$ from formula (1)

На рис. 19 розглянута аеродинаміка обтікання машзала та димової труби на різних висоті від земної поверхні. На висоті до 31 м труба обтікається потоком із малою швидкістю. Складна структура потоку формується за рахунок відриву потоку на бічних поверхнях будівлі та частково на його даху. Отже на висоті 31 м (вище даху машзала) на поверхні труби формується слабка зона підвищеної швидкості, на висоті труби 50 м і

більше поступово формується симетрична структура обтікання труби з різною довжиною «хвоста» за димовою трубою. Аналіз рис. 19 також показує, що в зоні «затінення» труби будинком машзала обтікання труби носить нерегулярний вихровий характер із формуванням граничних ліній – слідів обтікання будівлі машзала. Примежовий шар поверхні труби не утворюється, але на висоті 31 м и вище обтікання труби уже має характер зі зміщенням вихрової структури вправо.

Результати розрахунку усередненого по кутовій координаті коефіцієнта тепловіддачі представлені на рис. 20. До висоти труби 50 м розрахункова тепловіддача перевищує дані, отримані за рівнянням для одиночної труби при рівномірному профілі швидкості потоку, що набігає. В області 50–110 м, як і у варіанті 1, середня тепловіддача приблизно на 10% нижче за дані розрахунку, але біля гирла труби має місце локальне збільшення тепловіддачі.

Висновки

1. Димова труба ТЕС є одним із важливих елементів інфраструктури ТЕС, що забезпечує екологічно чистий викид продуктів згоряння в атмосферу. Важливою умовою її експлуатації є відсутність конденсації вологи на стінку труби для виключення її корозії та поступового руйнування.

2. Інфраструктура навколишнього простору та майданчика ТЕС, а також її розташування щодо будівлі машзала, відіграє важливу роль у розподілі аеродинаміки та теплообміну по висоті труби, що визначають умови конденсації вологи всередині труби.

3. Вперше виявлено змінний характер зміни швидкості потоку, статичного тиску та тепловіддачі по висоті кормової частини одиночної труби, що зумовлено її конічною формою.

4. Розподіл тепловіддачі по висоті димової труби має складний характер і визначається її розташуванням на майданчику ТЕС. Використання рівняння (1) призводить до значної похибки під час розрахунку тепловіддачі на зовнішній поверхні димової труби.

Список використаної літератури:

1. Джигирей В. С., Сторожук В. М., Яцюк Р. А. Основи екології та охорона навколишнього природного середовища (Екологія та охорона природи). Львів: Афіша, 2000. 272 с.
2. Кошлак Г. В., Павленко А. М. Зменшення техногенного впливу вугільних ТЕС на довкілля (на прикладі Бурштинської ТЕС) // Екологічна безпека та збалансоване ресурсокористання, 2017, № 2 (16), С. 108 – 118.
3. Батальцев Є.В. Моделювання техногенного впливу на навколишнє природне середовище об'єктами теплоенергетики // дис. ... канд. техн. наук. спец. 21.06.01, СумДУ, 2021. https://essuir.sumdu.edu.ua/bitstream-download/123456789/83581/5/diss_Bataltsev.pdf
4. Манеев А.П., Низовцев М.И., Терехов В.И. Влияние ветра на фильтрацию газов через оболочку дымовых труб // Теплоэнергетика, 2013, № 4, С. 20—26. – Режим доступу: DOI:10.1134/S0040363613040061
5. Зменшення вологовмісту димових газів у конденсаційних теплоутилізаторах котельних установок / Н. М. Фіалко, Р. О. Навродська, С. І. Шевчук, Г. О. Гнедаш, О. Ю. Глушак // Інститут технічної теплофізики НАН України, м. Київ, Україна. – Режим доступу: https://nv.nltu.edu.ua/Archive/2019/29_8/23.pdf

6. Дымовые трубы: традиции и инновации: монография / В. М. Асташкин, В. С. Жолудов, А. З. Корсунский и др.; под ред. д-ра техн. наук, проф. В. М. Асташкина и канд. техн. наук А. З. Корсунского. – Челябинск: Издательский центр ЮурГУ, 2011. – 496 с.
7. Войцехівський О.В., Попов В.О., Дорохова Н.Д. Стійкість рівноваги висотних димових труб на фундаментах мілкового закладання // Сучасні технології, матеріали і конструкції в будівництві. 2017. № 2, С. 42-49.
8. Обтікання кругового циліндра [електронний ресурс]. – Режим доступу: [https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Civil_Engineering/Book%3A_Fluid_Mechanics_\(Bar-Meir\)/10%3A_Inviscid_Flow_or_Potential_Flow/10.3_Potential_Flow_Functions_Inventory/10.3.1%3A_Flow_Around_a_Circular_Cylinder](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Civil_Engineering/Book%3A_Fluid_Mechanics_(Bar-Meir)/10%3A_Inviscid_Flow_or_Potential_Flow/10.3_Potential_Flow_Functions_Inventory/10.3.1%3A_Flow_Around_a_Circular_Cylinder)
9. CylinderW. A. KhanJ. R. CulhamM. M. Yovanovich Fluid Flow Around and Heat TransferFrom an Infinite Circular / CylinderW. A. KhanJ. R. CulhamM. M. Microelectronics Heat Transfer Laboratory,Department of Mechanical Engineering,University of Waterloo,Waterloo, Ontario, Canada N2L 3G1, Journal of Heat Transfer, 2005, Vol. 127, P.785 – 790. – Режим доступу: https://www.academia.edu/3539412/Fluid_Flow_Around_and_Heat_Transfer_From_a_n_Infinite_Circular_Cylinder
10. Чиркова А. П. Аеродинаміка та теплообмін одиночної конічної труби при зовнішньому обтіканні / А. П. Чиркова, А. А. Халатов, В. С. Олійник, О. В. Шіхабутінова // Теплофізика та теплоенергетики. – 2021. – Т. 43, № 4. – С. 25–33. – Бібліогр.: 10 назв. – ISSN 2663-7235. – DOI: <https://doi.org/10.31472/tpe.4.2021.3>.
11. Теплові електростанції [електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://corelamps.com/zahalne/teplovi-elektrostantsii/>
12. Манеев А. П., Терехов В. И. Аэродинамика и теплообмен дымовых труб. – АНО Издательский Дом «Научное обозрение», 2017. – 226 с.
13. Халатов А. А., Коваленко Г. В., Ільченко А. П., Олійник В. С., Шіхабутінова О. В. Вплив інфраструктури навколишньої поверхні на теплообмін і аеродинаміку конічної димової труби ТЕС // Тези доповідей Міжнародної науково-технічноїконференції «Енергетичні та теплотехнічні процеси й устаткування», Харків, 27–28 квітня 2021 р, НТУ «ХПІ» – С. 62-63. – Режим доступу: <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/66979>

References:

1. Dzhigirei V. S., Storozhuk V. M., Yatsyuk R. A. Basics of Ecology and Environmental Protection (Ecology and Nature Protection). Lviv: Afisha, 2000. 272 p.
2. Koshlak G. V., Pavlenko A. M. Reduction of technogenic impact of coal-fired TPPs on the environment (on the example of Burshtyn TPP) // Ecological safety and balanced resource use, 2017, No. 2 (16), P. 108 – 118.
3. Bataltsev E.V. Modeling of Man-Made Impact on the Surrounding Natural Environment by Thermal Power Facilities // thesis ... candidate of engineering sciences, specialty 21.06.01, Sumy State University, 2021. https://essuir.sumdu.edu.ua/bitstream-download/123456789/83581/5/diss_Bataltsev.pdf
4. Maneev A.P., Nyzovtsev M.I., Terekhov V.I. The Influence of Wind for Filtration of Gases Through the Shell of Smoke Pipes // Thermal Power Engineering, 2013, No. 4, P. 20—26. DOI:10.1134/S0040363613040061
5. Reducing the Moisture Content of Flue Gases in Condensing Heat Exchangers of Boiler Plants / N. M. Fialko, R. O. Navrodska, S. I. Shevchuk, G. O. Hnedash, O. Yu. Glushak

- // Institute of Technical Thermophysics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine. https://nv.nltu.edu.ua/Archive/2019/29_8/23.pdf
6. Chimneys: Traditions and Innovations: Monograph / V. M. Astashkin, V. S. Zholudov, A. Z. Korsunsky et al; editors: Dr. Engineering Sciences, prof. V. M. Astashkin and Ph.D in engineering sciences A. Z. Korsunsky – Chelyabinsk: Publishing Center of YuUR State University, 2011. – 496 p.
 7. Voytsehivskiy O.V., Popov V.O., Dorokhova N.D. Equilibrium Stability of Tall Chimneys on Shallow Foundations // Modern Technologies, Materials and Structures in Construction. 2017, No. 2, p. 42-49.
 8. Flow around a circular cylinder [electronic resource]. – Access mode: [https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Civil_Engineering/Book%3A_Fluid_Mechanics_\(Bar-Meir\)/10%3A_Inviscid_Flow_or_Potential_Flow/10.3_Potential_Flow_Functions_Inventory/10.3.1%3A_Flow_Around_a_Circular_Cylinder](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Civil_Engineering/Book%3A_Fluid_Mechanics_(Bar-Meir)/10%3A_Inviscid_Flow_or_Potential_Flow/10.3_Potential_Flow_Functions_Inventory/10.3.1%3A_Flow_Around_a_Circular_Cylinder)
 9. CylinderW. A. KhanJ. R. CulhamM. M. Yovanovich Fluid Flow Around and Heat TransferFrom an Infinite Circular / CylinderW. A. KhanJ. R. CulhamM. M. Microelectronics Heat Transfer Laboratory,Department of Mechanical Engineering,University of Waterloo,Waterloo, Ontario, Canada N2L 3G1, Journal of Heat Transfer, 2005, Vol. 127, P.785 – 790. – Access mode: https://www.academia.edu/3539412/Fluid_Flow_Around_and_Heat_Transfer_From_a_n_Infinite_Circular_Cylinder
 10. Chyrkova A. P. Aerodynamics and Heat Exchange of Single Conical Pipe with External Flow / A. P. Chirkova, A. A. Khalatov, V. S. Oliynyk, O. V. Shikhabutinova // Thermal Physics and Thermal Energy. – 2021. – Vol. 43, No. 4. – P. 25–33. – Bibliography: 10 titles. – ISSN 2663-7235. DOI: <https://doi.org/10.31472/tpe.4.2021.3>
 11. Thermal power plants [electronic resource]. – Access mode: <https://corelamps.com/zahalne/teplovi-elektrostantsii/>
 12. Maneev A.P., Terekhov V.I. Aerodynamics and Heat Exchange of Chimneys. – Publishing House "Scientific Review", 2017. – 226 p.
 13. Khalatov A. A., Kovalenko G. V., Ilchenko A. P., Oliynyk V. S., Shikhabutinova O. V. The Influence of Infrastructure of Surrounding Surface on Heat Exchange and Aerodynamics of Conical Chimney of the TPP // Abstracts of Reports of the International Scientific and Technical Conference "Energy and Heat Engineering Processes and Equipment", Kharkiv, April 27–28, 2021, NTU "KhPI" - pp. 62-63. – Access mode: <https://repository.kpi.kharkov.ua/handle/KhPI-Press/66979>

A. P. Chyrkova

PhD student

Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, Kyiv, Ukraine

ilcenkoanna777@gmail.com

PROBLEMS OF AERODYNAMICS AND HEAT EXCHANGE IN THE TRANSVERSE FLOW OF SINGLE CONICAL PIPE AT THE TPP SITE

Chimney of thermal power plants are an important element of the complex infrastructure of the TPP industrial site. However, insufficient attention is paid to chimney during calculations. In our country, the majority of chimneys are in an unsatisfactory condition, which leads to negative consequences for the ecological conditions of the environment and affects the operation of thermal power plants as a whole.

The paper presents the results of numerical modeling of aerodynamics and heat exchange

on the surface of a conical chimney located at the TPP site. The work uses the traditional RNG k - ε turbulence model for problems of this class. The uniform and height-variable wind speed profile determined by the infrastructure of the environment (different types of terrain) and the industrial site of the TPP are considered. The flow around the chimney has a complex character, with the formation of areas of separation flow and destruction of the boundary layer. It is shown that the location of the pipe relative to the infrastructure objects of the industrial site of the thermal power plant plays an important role in the distribution of velocity, static pressure, and heat exchange along the height of the pipe, which are periodic in height both with a uniform velocity profile and in the area above the engine room building with variable speed profiles of the oncoming air flow. It is shown that the use of the equation of two-dimensional flow around a round cylinder leads to a significant error when calculating the heat transfer on the outer surface of the conical smoke pipe. Such calculation results lead to inaccurate calculations and a reduction in the service life of smoke pipes of thermal power plants and destruction of their surface. Also, incorrect calculations of the heat transfer of the TPP smoke pipe will lead to condensation in its middle and also lead to cracks in the structure of the chimneys.

Keywords: chimney, aerodynamics, heat exchange, heat transfer coefficient, velocity profile, RNG k - ε turbulence model, ANSYS 2020-R1.

Одержано редакцією 14.09.2022

Прийнято до друку 18.10.2022

Зміст

ХАРАКТЕРНІ ОСОБЛИВОСТІ ПРОЦЕСУ ГІДРОМЕХАНІЧНОГО СИНТЕЗУ НАНОПОЯСІВ ПЕНТАОКСИДУ ВАНАДІЮ <i>Д. І. Коломієць</i> <i>М. О. Пасічний</i>	3
РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЇ З'ЄДНАННЯ МІДНИХ КОНТАКТІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ЕЛЕКТРОКОНДУКТИВНОГО СПІКАННЯ МІДНИХ ПОРОШКІВ <i>Ю. В. Ніколенко</i> <i>В. В. Морозович</i> <i>Ю. О. Ляшенко</i>	15
ДОСЛІДЖЕННЯ МОРФОЛОГІЇ КОНТАКТНОЇ ЗОНИ СПАЙНИХ КОНТАКТІВ МІДІ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ СЕГМЕНТАЦІЇ ЗОБРАЖЕНЬ СТРУКТУРНИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ ВЕЙВЛЕТ ПЕРЕТВОРЕННЯ <i>А. Р. Гонда</i> <i>Ю. О. Ляшенко</i>	23
НОВІ ТЕРМОДИНАМІЧНІ ПІДХОДИ ДО АНАЛІЗУ ВІДМОВ У МАТЕРІАЛАХ МІКРОЕЛЕКТРОНІКИ <i>А.М. Гусак</i> <i>А. Тітова</i>	33
ДИФУЗІЙНІ «СЮРПРИЗИ» В МОДЕЛЯХ ВЗАЄМНОЇ ДИФУЗІЇ <i>А. Р. Гонда</i> <i>А. М. Гусак</i>	47
АНАЛОГ ПРИНЦИПУ МАКСИМУМУ ДЛЯ КОЛИВНИХ ПРОЦЕСІВ <i>Ю. А. Андрєєва</i> <i>К. О. Буряченко</i>	61
ВПЛИВ ЗОВНІШНЬОГО ТИСКУ НА КІНЕТИКУ РОСТУ ФАЗИ У СИСТЕМІ CU-SN-CU <i>Д. І. Коломієць</i> <i>Є. В. Татарчук</i>	70
ДЕЯКІ ОСОБЛИВОСТІ АЕРОДИНАМІКИ ТА ТЕПЛООБМІНУ ПРИ ПОПЕРЕЧНОМУ ОБТІКАННІ ОДИНОЧНОЇ КОНІЧНОЇ ТРУБИ НА МАЙДАНЧИКУ ТЕС <i>А. П. Чиркова</i>	77

Content

SPECIFIC FEATURES OF HYDROMECHANICAL SYNTHESIS OF VANADIUM PENTAOXIDE NANOBELTS <i>D. I. Kolomiets</i> <i>M. O. Pasichnyy</i>	3
DEVELOPMENT OF A TECHNOLOGY FOR CONNECTING COPPER CONTACTS BY MEANS OF ELECTROCONDUCTIVE SINTERING OF COPPER POWDERS <i>Yu. V. Nikolenko</i> <i>V. V. Morozovych</i> <i>Yu. O. Lyashenko</i>	15
RESEARCH OF THE MORPHOLOGY OF THE CONTACT ZONE OF COPPER WELDED CONTACTS USING IMAGES SEGMENTATION OF STRUCTURAL ELEMENTS BASED ON WAVELET TRANSFORM <i>A. R. Honda</i> <i>Yu. O. Lyashenko</i>	23
NEW THERMODYNAMIC APPROACHES TO FAILURE ANALYSIS IN MICROELECTRONIC MATERIALS <i>A. M. Gusak</i> <i>A. Titova</i>	33
DIFFUSION “SURPRISES” IN INTERDIFFUSION MODELS <i>A. R. Honda</i> <i>A. M. Gusak</i>	47
ANALOG OF MAXIMUM PRINCIPLE FOR THE WAVE PROCESSES <i>Yu. A. Andreieva</i> <i>K. O. Buryachenko</i>	61
THE INFLUENCE OF EXTERNAL PRESSURE ON THE KINETICS OF PHASE GROWTH IN THE CU-SN-CU SYSTEM <i>D. I. Kolomiets</i> <i>E. V. Tatarchuk</i>	70
PROBLEMS OF AERODYNAMICS AND HEAT EXCHANGE IN THE TRANSVERSE FLOW OF SINGLE CONICAL PIPE AT THE TPP SITE <i>A. P. Chyrkova</i>	77

**ВІСНИК
ЧЕРКАСЬКОГО
УНІВЕРСИТЕТУ**

Серія фізико-математичні науки
№1. 2022

Відповідальний за випуск:
Ляшенко Ю.О.

Відповідальний секретар:
Сторожук Н.В.