ISSN 1727-2769

ДОКЛАДЫ **академии наук высшей школы** российской ФЕДЕРАЦИИ

№ 3 (60) ИЮЛЬ-СЕНТЯБРЬ 2023

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ





Журнал публикует статьи о новых конкретных результатах законченных оригинальных и особенно имеющих приоритетный характер исследований в области инноваций, а также в области физико-математических и технических наук по группам специальностей (в соответствии с распоряжением Минобрнауки России от 28.12.2018 № 90-р):

Физико-математические науки

- 1.3.8-Физика конденсированного состояния
- 1.3.14-Теплофизика и теоретическая теплотехника
- 2.2.13 Радиотехника, в том числе системы и устройства телевидения
- 2.2.14 Антенны, СВЧ устройства и их технологии
- 2.2.15-Системы, сети и устройства телекоммуникаций
- 2.2.16-Радиолокация и радионавигация

Технические науки

- 1.3.8-Физика конденсированного состояния
- 1.3.11-Физика полупроводников
- 1.3.14-Теплофизика и теоретическая теплотехника
- 2.2.13 Радиотехника, в том числе системы и устройства телевидения
- 2.2.14 Антенны, СВЧ устройства и их технологии
- 2.2.15-Системы, сети и устройства телекоммуникаций
- 2.2.16-Радиолокация и радионавигация
- 2.4.1 Теоретическая и прикладная электротехника
- 2.4.2-Электротехнические комплексы и системы

Все рукописи рецензируются, по результатам рецензирования редколлегия принимает решение о целесообразности опубликования материалов. Для авторов публикация является бесплатной.

Редакция журнала «Доклады АН ВШ РФ» просит авторов при подготовке статей строго соблюдать правила, доступные по адресу http://journals.nstu.ru/doklady/rules. Статьи, оформленные с нарушением правил, отклоняются без рецензирования.

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

2023

июль – сентябрь

№ 3 (60)

Выходит четыре раза в год ISSN 1727-2769

Учредитель

Новосибирский государственный технический университет

Главный редактор

А.Г. Вострецов, д-р техн. наук, проф., засл. деятель науки РФ

Заместитель главного редактора

В.Н. Васюков, д-р техн. наук, проф.

Редакционный совет

М. Грайцар, PhD, проф. (Словакия) Д.В. Винников, д-р техн. наук, проф. (Эстония) А. Загоскин, PhD (Великобритания) Е.В. Ильичев, д-р физ.-мат. наук, проф. (Германия) М.Н. Клымаш, д-р техн. наук, проф. (Украина) К.Ю. Арутюнов, д-р физ.-мат. наук, проф. А.В. Бурдаков, д-р физ.-мат. наук, проф. И.С. Грузман, д-р техн. наук, проф. А.О. Давидов, д-р техн. наук Г.Н. Девятков, д-р техн. наук, проф. В.П. Драгунов, д-р техн. наук, доц. С.Л. Елистратов, д-р техн. наук А.И. Легалов, д-р техн. наук, проф. И.Ф. Лозовский, д-р техн. наук, проф. В.Ю. Нейман, д-р техн. наук, проф. М.И. Низовцев, д-р техн. наук, проф. О.В. Нос, д-р техн. наук, проф. В.П. Разинкин, д-р техн. наук, проф. В.Я. Рудяк, д-р физ.-мат. наук, проф. А.А. Спектор, д-р техн. наук, проф. А.Н. Сычев, д-р техн. наук, проф. С.П. Халютин, д-р техн. наук, проф. С.А. Харитонов, д-р техн. наук, проф. В.Д. Юркевич, д-р техн. наук, проф.

Ответственный секретарь

Д.О. Соколова, канд. техн. наук

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций в 2021 г. (свидетельство ПИ № ФС 77–81374 от 30.06.2021 г.)

Адрес редакции, издателя: 630073, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20, НГТУ, корп. 1, ком. 346, телефон: (383) 315-39-42. E-mail: danvshrf@corp.nstu.ru

© Новосибирский государственный технический университет, 2023 г.

SCIENTIFIC JOURNAL

PROCEEDINGS OF THE RUSSIAN HIGHER SCHOOL ACADEMY OF SCIENCES

2023

July - September

№ 3 (60)

Journal is published quarterly ISSN 1727-2769

Journal was established by Novosibirsk State Technical University

Chief Editor

A.G. Vostretsov, D.Sc. (Eng.), Prof., Honoured Science Worker of Russian Federation

Deputy Chief Editor

V.N. Vasyukov, D.Sc. (Eng.), Prof.

Editorial Council

M. Grajcar, PhD, Prof. (Slovakia) D.V. Vinnikov, D.Sc. (Eng.), Prof. (Estonia) A.M. Zagoskin, PhD (United Kingdom) E.V. Ilvichev, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. (Germany) M.M. Klymash, D.Sc. (Eng.), Prof. (Ukraine) K.Yu. Arutyunov, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. A.V. Burdakov, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. I.S. Gruzman, D.Sc. (Eng.), Prof. A.O. Davidov, D.Sc. (Eng.) G.N. Devyatkov, D.Sc. (Eng.), Prof. V.P. Dragunov, D.Sc. (Eng.), Assoc. Prof. S.L. Elistratov, D.Sc. (Eng.) A.I. Legalov, D.Sc. (Eng.), Prof. I.F. Lozovskiy, D.Sc. (Eng.), Prof. V.Yu. Neyman, D.Sc. (Eng.), Prof. M.I. Nizovtsev, D.Sc. (Eng.), Prof. O.V. Nos, D.Sc. (Eng.), Prof. V.P. Razinkin, D.Sc. (Eng.), Prof. V.Ya. Rudyak, D.Sc. (Phys.&Math.), Prof. A.A. Spector, D.Sc. (Eng.), Prof. A.N. Sychev, D.Sc. (Eng.), Prof. S.P. Khaljutin, D.Sc. (Eng.), Prof. S.A. Haritonov, D.Sc. (Eng.), Prof. V.D. Yurkevich, D.Sc. (Eng.), Prof.

Executive Secretary

D.O. Sokolova, C.Sc.(Eng.)

Editor and Publisher Address: Office 346, 20 bld. 1, K. Marx Prospect, Novosibirsk, 630073, Russian Federation. Tel: +7 (383) 315-39-42. E-mail: danvshrf@corp.nstu.ru

© Novosibirsk State Technical University, 2023

2023

июль – сентябрь

№ 3 (60)

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Цыдыпов Д.Г., Номоев А.В., Гармаев Б.З.

Определение теплофизических свойств и функции	
радиального распределения наночастицы серебра	
с применением численных методов	20

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

PROCEEDINGS OF RUSSIAN HIGHER SCHOOL ACADEMY OF SCIENCES

2023

July – September

№ 3 (60)

CONTENTS

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

Emelyanov A.A, Plotnikov M.Yu., Timoshenko N.I., Yudin I.B
Gas-jet MPCVD synthesis of diamond coatings on substrates of
various materials7

Tsydypov D.G., Nomoev A.V., Garmaev B.Z.

Determination of thermophysical properties and the radial distribution function of a silver nanoparticle using numerical methods......20

TECHNICAL SCIENCES

Arbuzov V.A., Arbuzov E.V., Dubnishchev Yu.N.,	
Zolotukhina O.S., Lukashov V.V.	
Optical hilbert tomography of gas jets	59

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль-сентябрь

№ 3 (60)

= ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ =

УДК 54.057

2023

ГАЗОСТРУЙНЫЙ MPCVD СИНТЕЗ АЛМАЗНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ПОДЛОЖКАХ ИЗ РАЗЛИЧНОГО МАТЕРИАЛА

А.А. Емельянов, М.Ю. Плотников, Н.И. Тимошенко, И.Б. Юдин

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН

Представлены результаты экспериментального исследования возможности нанесения алмазных покрытий на подложки из различных материалов новым газоструйным методом с СВЧ-активацией газов – прекурсоров. Описана разработанная экспериментальная установка для нанесения алмазных покрытий. Алмазные покрытия осаждены на подложки из молибдена, кремния с окисной пленкой или карбида кремния на поверхности, карбида вольфрама, нитрида титана, плавленого кварца и на алмазный кристалл. В условиях высоких температур и больших тепловых потоков к подложке удалось обеспечить ее целостность благодаря использованию специально разработанной конструкции подложкодержателя. Полученные образцы алмазных покрытий исследовались методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и в настоящее время проходят испытания в условиях, требуемых для различных приложений.

Ключевые слова: газоструйное осаждение, алмазные покрытия, СВЧ-активация, кристаллическая структура, спектры комбинационного рассеяния

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-7-19

1. Введение

СVD-осаждение (Chemical vapor deposition) алмаза представляет собой совокупность физико-химических процессов, а именно: диссоциация водорода и углеводородного носителя с образованием радикалов-предшественников алмаза, их транспорт к поверхности, нуклеация – зарождение на поверхности центров формирования алмаза и рост с образованием сплошной поликристаллической алмазной пленки толщиной от единиц до сотен мкм. Рост термодинамически неустойчивой алмазной sp^3 -фазы, формирующейся на поверхности подложки, сопровождается одновременным зарождением устойчивой графитной sp^2 -фазы. Наличие атомарного водорода стабилизирует рост алмаза благодаря тому, что скорость травления алмазной sp^3 -фазы углерода атомарным водородом гораздо ниже скорости травления sp^2 -углерода. В конечном итоге при правильном подборе определяющих параметров процесса (соотношения атомарного водорода и углеродсодержащей компоненты, температуры подложки) формируется алмазная структура хорошего качества [1–3].

Высокая твердость и теплопроводность, износостойкость и химическая инертность являются ключевыми свойствами алмаза [4, 5], поэтому покрытия из поликристаллического алмаза могут быть использованы в теплоотводах [6, 7], режущих инструментах [8] и для нанесения защитного слоя. По среднему размеру алмазных зерен поликристаллические алмазные материалы классифицируются как микрокристаллические, нанокристаллические и ультрананокристаллические [9].

Работа выполнена в рамках государственного задания (бюджетный грант № 121031800218-5).

^{© 2023} Емельянов А.А., Плотников М.Ю., Тимошенко Н.И., Юдин И.Б.

Пленки и толстые пластины высококачественного микрокристаллического алмаза обладают высокой теплопроводностью и низким оптическим поглощением. Поэтому они предпочтительны для различных радиаторов [10] и других устройств. Нанокристаллический алмаз состоит из алмазных зерен размером 10...100 нм и характеризуется пониженной кристалличностью и более высокой концентрацией неалмазных фаз по сравнению с микрокристаллическим [11]. Однако такие пленки обладают малым коэффициентом трения в сочетании с относительно высокой твердостью и поэтому используются при формировании износостойких инструментов [12]. Ультрананокристаллические покрытия широко используются в качестве биосовместимых защитных покрытий [13], а азотсодержащие – для изготовления электрохимических и терморегулирующих приложений [14]. Формирование алмазного покрытия, адаптированного для потребителя, требует разработки различных методов синтеза алмаза, а также использования материалов подложки, подходящих для требуемых условий.

В соответствии с этим группа под руководством академика РАН А.К. Реброва занимается развитием газоструйного метода синтеза алмазов, позволяющего перейти от низкоскоростного диффузионного процесса переноса «строительного» материала к подложке к струйному переносу. На начальном этапе исследовались возможности горячепроволочной активации газов-предшественников [15–17]. Накопленный опыт был использован для развития газоструйной модификации метода MPCVD (Microwave Plasma Chemical Vapor Deposition) с активацией газов-предшественников в СВЧ-разряде [18–22]. Показана возможность достижения таким методом больших скоростей синтеза алмаза из метановодородной смеси [20] и смеси метана, водорода и аргона [22].

Ряд работ [23–26] был посвящен исследованию возможностей применения метода для создания алмазных покрытий со специальными свойствами.

В настоящей работе представлены результаты газоструйного MPCVD осаждения алмазных покрытий на подложках из различного материала.

2. Материалы и методы

На рис. 1 представлена схема установки для MPCVD синтеза алмазных покрытий. В вакуумной камере расположены реактор (разрядная камера) и камера осаждения с подложкой. Геометрия и размеры разрядной камеры выбраны из соображений достижения резонансных условий СВЧ-разряда. В атмосферной части находится магнетрон для генерации СВЧ-излучения (2,45 ГГц). Разрядная камера отделена от камеры осаждения коническим соплом, направленным острием в разрядную камеру. СВЧ-разряд образует плазменное облако, «привязанное» к острию сопла, где происходит активация подаваемых водорода и углеродсодержащего газа. Перепад давления на сопле обеспечивает сверхзвуковое истечение из сопла с последующей доставкой активированных компонент к подложке. Магнетрон отделен от вакуумной части герметичной диэлектрической вставкой.

Для нанесения качественного алмазного покрытия необходимо обеспечить малые градиенты параметров активированного газа у подложки и температуры поверхности подложки.

Контактное тепловое сопротивление между подложкой и твердой поверхностью подложкодержателя может быть большим и неравномерным по площади. Для устранения этого подложка «ложится» на расплав металла и благодаря этому снижается контактное тепловое сопротивление и выравнивается поле температуры поверхности подложки. Более подробное описание конструкции подложкодержателя приведено в [27].



Рис. 1 – Схема установки для MPCVD синтеза алмазных покрытий: 1 – разрядная камера (реактор); 2 – камера осаждения; 3 – СВЧ-разряд; 4 – сопло; 5 – струя активированного газа; 6 – подложкодержатель; 7 – подложка (мишень); 8 – магнетрон; 9 – волновод; 10 – диэлектрическая вставка; 11 – вакуумная откачка

Fig. 1 – Installation diagram for MPCVD synthesis of diamond coatings: 1 – is a discharge chamber (reactor); 2 – is a deposition chamber; 3 – is a microwave discharge; 4 – is a nozzle; 5 – is an activated gas jet; 6 – is a substrate holder; 7 – is a substrate (target);

8 – is a magnetron; 9 – is a waveguide; 10 – is a dielectric insert; 11 – is vacuum pumping

Отметим, что в представленных экспериментах стимуляция зародышеобразования алмаза нанесением на подложку дополнительных центров нуклеации не проводилась.

Использованы различные материалы подложек: кремний, кремний с нанесенным на поверхность тонким слоем карбида кремния или окиси кремния, плавленый кварц, молибден, нитрид титана, карбид вольфрама, алмаз. Размер подложек составлял 12×12 мм, толщина – от долей до полутора миллиметров. Различные материалы подложек выбирались из соображений перспективности их использования для различных возможных приложений, в том числе описанных выше.

Эксперименты были выполнены с использованием оборудования УНУ ВГК ИТ СО РАН (уникальной научной установки вакуумного газодинамического комплекса Института теплофизики СО РАН). Полученные образцы алмазных покрытий исследовались методами сканирующей электронной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света в центрах коллективного пользования ИНХ СО РАН и ИФП СО РАН.

3. Результаты и их обсуждение

Осаждение алмазных покрытий на подложки из различных материалов осуществлялось на описанной выше установке MPCVD при расходах водорода 8...10 н.л/мин, концентрации метана 1 %, давление в реакторе и камере осаждения поддерживалось с перепадом, обеспечивающим сверхзвуковое истечение активированного газа из сопла, расстояние срез сопла – подложка 25 мм, температура подложки около 950 °C.

На рис. 2 представлены СЭМ фотографии алмазных покрытий на алмазном кристалле с ориентацией <100>. Алмазный кристалл получен осаждением при высоких давлениях в Институте геологии и минералогии СО РАН. Алмазная подложка была использована для проверки возможности эпитаксиального осаждения алмаза газоструйным методом. Такая возможность позволила бы синтезировать монокристаллы и управлять содержанием в них примеси, что особенно важно для электроники и некоторых оптических применений.



Рис. 2 – СЭМ фотографии поверхности осажденной пленки на алмазной подложке
Fig. 2 – SEM photos of the surface of the deposited film on a diamond substrate

Проведенные исследования показали, что рост алмазного покрытия при использовании газоструйного метода происходит с такой большой скоростью, что на образующихся алмазных поверхностях зарождаются новые кристаллы при одновременном росте этой поверхности. Таким образом, эпитаксиальное осаждение алмаза данным методом реализовать не удалось. Однако эти результаты показывают возможности метода, в частности возможность наращивания поликристаллического алмаза на кристалл.

Из представленных на рис. З СЭМ фотографий алмазных структур, полученных на молибденовой подложке газоструйным методом, видна характерная структура покрытия с квадратными основаниями кристаллов алмаза. Параметры осаждения: расход водорода 10 н.л/мин, концентрация метана 1 %, расстояние срез сопла – подложка 25 мм, температура подложки около 950 °С. На рис 3, a - СЭМфотография покрытия, полученного за 3 часа, на рис 3, $\delta - за$ 15 мин. Время осаждения выбрано из практических соображений получения качественного СЭМ снимка (15 мин) и получения сплошного покрытия (3 часа). Соответственно, за большее время получено сплошное покрытие в сравнении с отдельными кристаллами справа. На приведенном спектре КРС (рис. 3, e) линия алмаза четко выражена, рост интенсивности на спектре правее алмазной линии обусловлен флуоресценцией аморфного углерода.

Алмазное покрытие на кремниевой подложке, полученное за время 15 мин (рис. 4), состоит из отдельных конгломератов кристаллов. На спектре КРС ярко выражена линия алмаза и слабо – флуоресценция примесей неалмазного углерода. Наличие окисной пленки на поверхности кремния не повлияло на структуру, кристалличность и скорость осаждения алмаза.

Кристаллические структуры алмаза и карбида кремния близки. Поэтому поверхность кремниевой подложки обычно карбидизируют для получения однородного алмазного покрытия с хорошей адгезией. Карбидизацию подложек, используемых в наших экспериментах, осуществляли с помощью ионной имплантации в Институте полупроводников СО РАН. Кроме того, карбидизация осуществлялась непосредственно при осаждении алмазного покрытия, поскольку в активированном газе присутствуют углеродсодержащие радикалы. На рис. 5 представлены СЭМ изображения таких покрытий. Представлены снимки разных участков покрытия. Кристаллическая структура хорошо видна, размеры кристаллов около 10 мкм. Такие покрытия предполагается использовать для теплоотвода от микроэлектронных устройств. Опытные образцы таких устройств в настоящее время находятся в стадии изготовления совместно с Институтом полупроводников СО РАН.



Рис. 3 – Алмаз на молибдене: a, б – СЭМ фотографии; в – КРС спектр покрытия Fig. 3 – Diamond on molybdenum: a, б – SEM photo; в – Raman spectrum of coverage



Puc. 4 – Алмаз на кремниевой подложке (СЭМ фотография и КРС спектр) *Fig.* 4 – Diamond on a silicon substrate (SEM photo and Raman spectrum)



Puc. 5 – Алмаз на карбиде кремния *Fig.* 5 – Diamond on silicon carbide

На рис. 6 представлено СЭМ изображение алмазного покрытия, полученного на кремниевой карбидизированной поверхности из метановодородной смеси с добавкой около 12 % аргона. Благодаря добавке аргона температура активации в разрядной камере повысилась примерно на 500 °C, что привело к большей диссоциации водорода и соответственно интенсифицировало процесс синтеза алмаза. На рис. 6 видны мелкие зарождающиеся кристаллы алмаза на уже образовавшихся кристаллах, благодаря чему образуется ветвистая кристаллическая структура.



Рис. 6 – СЭМ фотография покрытия на карбидизированной поверхности кремния с добавлением аргона в смесь газов

Fig. 6 - A SEM photo of a coating on a carbidized silicon surface with the addition of argon to a mixture of gases

На рис. 7 представлено СЭМ изображение алмазного покрытия на подложке из карбида вольфрама, зерна которого «склеены» кобальтом. Этот материал выбран для разработки возможности улучшения износостойкости изделий, которые используются на практике. Известно, что наличие кобальта не способствует образованию кристаллов алмаза [28, 29]. Поэтому на данную подложку был осажден TiN толщиной несколько сот нанометров. Процесс осаждения алмазного покрытия был интенсифицирован добавлением в метановодородную смесь аргона. Благодаря этим мерам на подложке WC с содержанием Со получено сплошное алмазное покрытие с размером кристаллов в несколько мкм. Полученные образцы проходят испытания в условиях предполагаемой эксплуатации.

Получение алмазного покрытия на материалах с низкой теплопроводностью затруднено вследствие перегрева и разрушения подложки. Плавленый кварц (коэффициент теплопроводности 1,38 Вт/м · К) стоит в ряду таких материалов. Необходимость нанесения алмазных покрытий на плавленый кварц обусловлено приложениями, в частности задачами увеличения теплоотвода от различных конструкций на пластинах из кварца, улучшением износостойкости кварцевой оптики и др. На рис. 8 представлен КРС спектр поверхности алмазного покрытия на таком материале. Линия алмаза ярко выражена, излучение примесных компонент невелико.



Рис. 7 – СЭМ изображение алмазного покрытия на подложке из карбида вольфрама





Заключение

В работе показано, что газоструйный метод с использованием для активации газов-предшественников СВЧ-разряда позволяет наносить алмазные покрытия на подложки из различных материалов, востребованных для различных приложений. Показана возможность получения алмазных покрытий различной структуры. При переходе от центра покрытия к краям происходит изменение условий роста, что проявляется в нарушении сплошности покрытия и изменению преобладающих ростовых граней алмазов. Наиболее однородное покрытие получено на молибденовой подложке, поскольку образующийся на поверхности карбид молибдена способствует синтезу алмаза, а высокая теплопроводность металла – однородности температуры поверхности. Полученные алмазные покрытия на карбидизиро-

ванном кремнии, нитриде титана и карбиде вольфрама с включениями кобальта в настоящее время проходят испытания в условиях предполагаемой эксплуатации.

Авторы выражают благодарность коллегам из центров коллективного пользования ИНХ СО РАН и ИФП СО РАН за снимки на электронном микроскопе и спектры комбинационного рассеяния полученных образцов.

ЛИТЕРАТУРА

- Liu H., Dandy D.S. Studies on nucleation process in diamond CVD: an overview of recent developments // Diamond and Related Materials. – 1995. – Vol. 4, iss. 10. – P. 1173–1188. – DOI: 10.1016/0925-9635(96)00297-2.
- Synthesis of polycrystalline diamond films in microwave plasma at ultrahigh concentrations of methane / A. Martyanov, I. Tiazhelov, S. Savin, V. Voronov, V. Konov, V. Sedov // Coatings. – 2023. – Vol. 13 (4). – P. 751. – DOI: 10.3390/coatings13040751.
- 3. Ребров А.К. Возможности газофазного синтеза алмазных структур // Успехи физических наук. 2017. Т. 187, № 2. С. 193–200. DOI: 10.3367/UFNr.2016.04.037794.
- Hierarchically structured diamond composite with exceptional toughness / Y. Yue, Y. Gao, W. Hu et al. // Nature. – 2020. – Vol. 582. – P. 370–374. – DOI: 10.1038/s41586-020-2361-2.
- Thermal conductivity of high purity synthetic single crystal diamonds / A.V. Inyushkin, A.N. Taldenkov, V.G. Ralchenko, A.P. Bolshakov, A.V. Koliadin, A.N. Katrusha // Physical Review B. – 2018. – Vol. 97. – P. 144305. – DOI: 10.1103/PhysRevB.97.144305.
- GaN-based heterostructures with CVD diamond heat sinks: A new fabrication approach towards efficient electronic devices / M. Chernykh, A. Andreev, I. Ezubchenko, I. Chernykh, I. Mayboroda, E. Kolobkova, Yu.V. Khrapovitskaya, J. Grishchenko, P. Perminov, V. Sedov, A.K. Martyanov, A.S. Altakhov, M.S. Komlenok, V.P. Pashinin, A.G. Sinogeykin, V.I. Konov, M.L. Zanaveskin // Applied Materials Today. 2022. Vol. 26. P. 101338. DOI: 10.1016/j.apmt.2021.101338.
- Effect of substrate holder design on stress and uniformity of large-area polycrystalline diamond films grown by microwave plasma-assisted CVD / V. Sedov, A. Martyanov, A. Altakhov, A. Popovich, M. Shevchenko, S. Savin, E. Zavedeev, M. Zanaveskin, A. Sinogeykin, V. Ralchenko, V. Konov // Coatings. – 2020. – Vol. 10. – P. 939. – DOI: 10.3390/coatings 10100939.
- Plateholder design for deposition of uniform diamond coatings on WC-Co substrates by microwave plasma CVD for efficient turning application / E. Ashkihazi, V. Sedov, D. Sovyk, A. Khomich, A. Bolshakov, S. Ryzhkov, D. Vinogradov, V. Ralchenko, V. Konov // Diamond and Related Materials. 2017. Vol. 75. P. 169–175. DOI: 10.1016/j.diamond. 2017.04.011.
- Synthesis and characterization of microcrystalline diamond to ultrananocrystalline diamond films via Hot Filament Chemical Vapor Deposition for scaling to large area applications / E.M.A. Fuentes-Fernandez, J.J. Alcantar-Peña, G. Lee, A. Boulom, H. Phan, B. Smith, T. Nguyen, S. Sahoo, F. Ruiz-Zepeda, M.J. Arellano-Jimenez, P. Gurman, C.A. Martinez-Perez, M.J. Yacaman, R.S. Katiyar, O. Auciello // Thin Solid Films. – 2016. – Vol. 603. – P. 62–68. – DOI: 10.1016/j.tsf.2015.11.088.
- Thick, adherent diamond films on AlN with low thermal barrier resistance / S. Mandal, C. Yuan, F. Massabuau, J.W. Pomeroy, J. Cuenca, H. Bland, E. Thomas, D. Wallis, T. Batten, D. Morgan // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2019. – Vol. 11. – P. 40826– 40834. – DOI: 10.1021/acsami.9b13869.
- A comparative study of the growth dynamics and tribological properties of nanocrystalline diamond films deposited on the <110> single crystal diamond and Si <100> substrates / V. Podgursky, A. Bogatov, M. Yashin, M. Viljus, A. Bolshakov, V. Sedov, O. Volobujeva, A. Mere, T. Raadik, V. Ralchenko // Diamond and Related Materials. 2019. Vol. 92. P. 159–167. DOI: 10.1016/j.diamond.2018.12.024.
- Load sensitive super-hardness of nanocrystalline diamond coatings / G. Cicala, V. Magaletti, G. Carbone, G.S. Senesi // Diamond and Related Materials. – 2020. – Vol. 101. – P. 107653. – DOI: 10.1016/j.diamond.2019.107653.

- A biocompatible ultrananocrystalline diamond (UNCD) coating for a new generation of dental implants / O. Auciello, S. Renou, K. Kang, D. Tasat, D. Olmedo // Nanomaterials. – 2022. – Vol. 12. – P. 782. – DOI: 10.3390/nano12050782.
- Nitrogenated nanocrystalline diamond films: Thermal and optical properties / V. Ralchenko, S. Pimenov, V. Konov, A. Khomich, A. Saveliev, A. Popovich, I. Vlasov, E. Zavedeev, A. Bozhko, E. Loubnin, R. Khmelnitskii // Diamond and Related Materials. – 2007. – Vol. 16. – P. 2067–2073. – DOI: 10.1016/j.diamond.2007.05.005.
- Growth of diamond structures using high speed gas jet deposition activated in heated tungsten channels / A.K. Rebrov, M.N. Andreev, T.T. Bieiadovskii, K.V. Kubrak // Surface & Coatings Technology. – 2017. – Vol. 325. – P. 210–218. – DOI: 10.1016/j.surfcoat. 2017.06.060.
- Синтез алмазных структур из струи смеси H₂ + CH₄ в спутном осесимметричном потоке водорода / А.К. Ребров, А.А. Емельянов, М.Ю. Плотников, И.Б. Юдин // Прикладная механика и техническая физика. – 2017. – Т. 58, №5 (345). – С. 142–150.
- Gas-jet HFCVD synthesis of diamonds from mixtures of hydrogen with ethylene and methane / M.Yu. Plotnikov, Yu.E. Gorbachev, A.A. Emelyanov, D.V. Leshchev, A.K. Rebrov, N.I. Timoshenko, I.B. Yudin // Diamond and Related Materials. – 2022. – Vol. 130. – P. 109505. – DOI: 10.1016/j.diamond.2022.109505.
- Синтез алмазов из микроволновой плазмы с использованием сверхзвуковых потоков газа / А.К. Ребров, М.В. Исупов, А.Ю. Литвинцев, В.Ф. Буров // Прикладная механика и техническая физика. – 2018. – Т. 59, № 5 (351). – С. 5–12.
- Experience in the synthesis of diamond from a supersonic microwave plasma jet / A.K. Rebrov, M.S. Bobrov, A.A. Emelyanov, N.I. Timoshenko, M.Yu. Hrebtov, I.B. Yudin // Interfacial Phenomena and Heat Transfer. – 2019. – Vol. 7 (2). – P. 131–137. – DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2019031315.
- Синтез алмаза из высокоскоростного потока СВЧ-плазмы / А.К. Ребров, А.А. Емельянов, М.Ю. Плотников, Н.И. Тимошенко, И.Б. Юдин. // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. – 2020. – Т. 490, № 1. – С. 48–51. – DOI: 10.31857/S2686740020010198.
- Effect of methane flow rate on gas-jet MPCVD diamond synthesis / A.A. Emelyanov, V.A. Pinaev, M.Yu. Plotnikov, A.K. Rebrov, N.I. Timoshenko, I.B. Yudin // Journal of Physics D: Applied Physics. - 2022. - Vol. 55 (20). - P. 205202. - DOI: 10.1088/1361-6463/ac526e.
- Газоструйный синтез алмазных покрытий из смеси H₂+CH₄+Ar, активированной в СВЧ-разряде / А.К. Ребров, А.А. Емельянов, В.А. Пинаев, М.Ю. Плотников, Н.И. Тимошенко, И.Б. Юдин // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. – 2022. – Т. 505, № 1. – С. 45–49.
- 23. Квантовые сенсоры физических полей на ансамблях пу центров в алмазных наноструктурах / С.Н. Подлесный, И.А.Карташов, С.М. Тарков, В.А. Володин, В.П. Попов, И.Н. Куприянов, Ю.Н. Пальянов, А.А. Емельянов, Н.И. Тимошенко, А.К. Ребров // Фотоника 2021: тезисы докладов, 4–8 октября 2021 г. – Новосибирск, 2021. – С. 35. – DOI: 10.34077/RCSP2021-35.
- Applicability of gas-jet MPCVD polycrys-talline diamond films on silicon with NV centers in quantum magnetometry / S.M. Tarkov, V.A. Antonov, S.N. Podlesny, A.A. Yemelyanov, A.K. Rebrov, V.P. Popov, V.A. Volodin, V.I. Vdovin, N.I. Timoshenko, I.B. Yudin, V.A. Nadolinny // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – Vol. 2119. – P. 012120. – DOI: 10.1088/1742-6596/2119/1/012120.
- Structure of a diamond deposited from microwave plasma by a new gas-jet method / A.P. Yelisseyev, A.A. Emelyanov, A.K. Rebrov, N.I. Timoshenko, I.B. Yudin, S.A. Gromilov, A.T. Titov, M.Yu. Plotnikov // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. – 2021. – Vol. 94. – P. 105386.
- 26. Влияние температуры молибденовых подложек на строение алмазных покрытий, полученных методом газофазного осаждения из высокоскоростного потока СВЧ-плазмы / Ю.В. Федосеева, Д.В. Городецкий, А.А. Макарова, И.Б. Юдин, Н.И. Тимошенко, М.Ю. Плотников, А.А. Емельянов, А.К. Ребров, А.В. Окотруб // Журнал структурной химии. – 2021. – Т. 62, № 1. – С. 157–166.

- Effective cooling of substrates with low thermal conductivity under conditions of gas-jet MPCVD diamond synthesis / A.A. Emelyanov, M.Yu. Plotnikov, N.I. Timoshenko, I.B. Yudin // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – Vol. 2119. – P. 012119. – DOI: 10.1088/1742-6596/2119/1/012119.
- Growth and mechanical properties of diamond films on cemented carbide with buffer layers / M.N. Liu, Y.B. Bian, S.J. Zheng, T. Zhu, Y.G. Chen, Y.L. Chen, J.S. Wang // Thin Solid Films. – 2015. – Vol. 584. – P. 165–169. – DOI: 10.1016/j.tsf.2015.01.021.
- 29. Газоструйное осаждение алмаза на стальной поверхности, покрытой слоем WC-CO или Мо / А.К. Ребров, И.С. Батраев, Т.Т. Бъядовский, Е.В. Гладких, А.С. Усеинов, М.Н. Хомяков // Прикладная механика и техническая физика. – 2019. – Т. 60, № 6. – С. 118–129.

GAS-JET MPCVD SYNTHESIS OF DIAMOND COATINGS ON SUBSTRATES OF VARIOUS MATERIALS

Emelyanov A.A., Plotnikov M.Yu., Timoshenko N.I., Yudin I.B.

Institute of Thermophysics of the SB RAS, Novosibirsk, Russia

The results of an experimental study of the possibility of applying diamond coatings to substrates made of various materials by a new gas-jet method with microwave activation of precursor gases are presented. The developed experimental setup for applying diamond coatings is described. Diamond coatings are deposited on substrates of molybdenum, silicon with an oxide film or silicon carbide on the surface, tungsten carbide, titanium nitride, fused quartz, and on a diamond crystal. Under conditions of high temperatures and high heat fluxes to the substrate, it was possible to ensure its integrity due to the use of a specially developed substrate holder design. The resulting samples of diamond coatings were studied by scanning electron microscopy (SEM) and Raman spectroscopy (RS) and are currently being tested under the conditions required for various applications.

Keywords: gas-jet deposition, diamond coatings, microwave activation, crystal structure, Raman spectra.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-7-19

REFERENCES

- Liu H., Dandy D.S. Studies on nucleation process in diamond CVD: an overview of recent developments. *Diamond and Related Materials*, 1995, vol. 4, iss. 10, pp. 1173–1188. DOI: 10.1016/0925-9635(96)00297-2.
- Martyanov A., Tiazhelov I., Savin S., Voronov V., Konov V., Sedov V. Synthesis of polycrystalline diamond films in microwave plasma at ultrahigh concentrations of methane. *Coatings*, 2023, vol. 13 (4), p. 751. DOI: 10.3390/coatings13040751.
- Rebrov A.K. Possibilities of gas-phase synthesis of diamond structures from mixtures of hydrogen and hydrocarbons. *Physics-uspekhi*, 2017, vol. 60 (2), pp. 179–186. DOI: 10.3367/UFNe.2016.04.037794. Translated from *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2017, vol. 187 (2), pp. 193–200. DOI: 10.3367/UFNr.2016.04.037794.
- 4. Yue Y., Gao Y., Hu W., et al. Hierarchically structured diamond composite with exceptional toughness. *Nature*, 2020, vol. 582, pp. 370–374. DOI: 10.1038/s41586-020-2361-2.
- Inyushkin A.V., Taldenkov A.N., Ralchenko V.G., Bolshakov A.P., Koliadin A.V., Katrusha A.N. Thermal conductivity of high purity synthetic single crystal diamonds. *Physical Review B*, 2018, vol. 97, p. 144305. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.144305.
- Chernykh M., Andreev A., Ezubchenko I., Chernykh I., Mayboroda I., Kolobkova E., Khrapovitskaya Yu.V., Grishchenko J., Perminov P., Sedov V., Martyanov A.K., Altakhov A.S., Komlenok M.S., Pashinin V.P., Sinogeykin A.G., Konov V.I., Zanaveskin M.L. GaN-based heterostructures with CVD diamond heat sinks: A new fabrication approach towards efficient electronic devices. *Applied Materials Today*, 2022, vol. 26, p. 101338. DOI: 10.1016/j.apmt.2021.101338.

- Sedov V., Martyanov A., Altakhov A., Popovich A., Shevchenko M., Savin S., Zavedeev E., Zanaveskin M., Sinogeykin A., Ralchenko V., Konov V. Effect of substrate holder design on stress and uniformity of large-area polycrystalline diamond films grown by microwave plasma-assisted CVD. *Coatings*, 2020, vol. 10, p. 939. DOI: 10.3390/coatings10100939.
- Ashkihazi E., Sedov V., Sovyk D., Khomich A., Bolshakov A., Ryzhkov S., Vinogradov D., Ralchenko V., Konov V. Plateholder design for deposition of uniform diamond coatings on WC-Co substrates by microwave plasma CVD for efficient turning application. *Diamond* and Related Materials, 2017, vol. 75, pp. 169–175. DOI: 10.1016/j.diamond.2017.04.011.
- Fuentes-Fernandez E., Alcantar-Peña J., Lee G., Boulom A., Phan H., Smith B., Nguyen T., Sahoo S., Ruiz-Zepeda F., Arellano-Jimenez M., Gurman P., Martinez-Perez C.A., Yacaman M.J., Katiyar R.S., Auciello O. Synthesis and characterization of microcrystalline diamond to ultrananocrystalline diamond films via Hot Filament Chemical Vapor Deposition for scaling to large area applications. *Thin Solid Films*, 2016, vol. 603, pp. 62–68. DOI: 10.1016/ j.tsf.2015.11.088.
- Mandal S., Yuan C., Massabuau F., Pomeroy J.W., Cuenca J., Bland H., Thomas E., Wallis D., Batten T., Morgan D. Thick, adherent diamond films on AlN with low thermal barrier resistance. ACS Applied Materials & Interfaces, 2019, vol. 11, pp. 40826–40834. DOI: 10.1021/acsami.9b13869.
- Podgursky V., Bogatov A., Yashin M., Viljus M., Bolshakov A., Sedov V., Volobujeva O., Mere A., Raadik T., Ralchenko V. A comparative study of the growth dynamics and tribological properties of nanocrystalline diamond films deposited on the <110> single crystal diamond and Si <100> substrates. *Diamond and Related Materials*, 2019, vol. 92, pp. 159– 167. DOI: 10.1016/j.diamond.2018.12.024.
- 12. Cicala G., Magaletti V., Carbone G., Senesi G.S. Load sensitive super-hardness of nanocrystalline diamond coatings. *Diamond and Related Materials*, 2020, vol. 101, p. 107653. DOI: 10.1016/j.diamond.2019.107653.
- Auciello O., Renou S., Kang K., Tasat D., Olmedo D. A biocompatible ultrananocrystalline diamond (UNCD) coating for a new generation of dental implants. *Nanomaterials*, 2022, vol. 12, p. 782. DOI: 10.3390/nano12050782.
- Ralchenko V., Pimenov S., Konov V., Khomich A., Saveliev A., Popovich A., Vlasov I., Zavedeev E., Bozhko A., Loubnin E., Khmelnitskii R. Nitrogenated nanocrystalline diamond films: Thermal and optical properties. *Diamond and Related Materials*, 2007, vol. 16, pp. 2067–2073. DOI: 10.1016/j.diamond.2007.05.005.
- Rebrov A.K., Andreev M.N., Bieiadovskii T.T., Kubrak K.V. Growth of diamond structures using high speed gas jet deposition activated in heated tungsten channels. *Surface & Coatings Technology*, 2017, vol. 325, pp. 210–218. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2017.06.060.
- Rebrov A.K., Emel'yanov A.A., Plotnikov M.Yu., Yudin I.B. Synthesis of diamond structure from the jet of the H₂ + CH₄ mixture in a concurrent axisymmetric hydrogen flow. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics volume*, 2017, vol. 58 (5), pp. 881–888. DOI: 10.1134/S0021894417050145. Translated from *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 2017, vol. 58, no. 5 (345), pp. 142–150.
- Plotnikov M.Yu., Gorbachev Yu.E., Emelyanov A.A., Leshchev D.V., Rebrov A.K., Timoshenko N.I., Yudin I.B. Gas-jet HFCVD synthesis of diamonds from mixtures of hydrogen with ethylene and methane. *Diamond and Related Materials*, 2022, vol. 130, p. 109505. DOI: 10.1016/j.diamond.2022.109505.
- Rebrov A.K., Isupov M.V., Litvintsev A.Y., Burov V.F. Synthesis of diamonds from the microwave plasma with the use of supersonic gas flows. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics volume*, 2018, vol. 59 (5), pp. 771–777. DOI: 10.1134/S0021894418050012. Translated from *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 2018, vol. 59, no. 5 (351), pp. 5–12.
- Rebrov A.K., Bobrov M.S., Emelyanov A.A., Timoshenko N.I., Hrebtov M.Yu., Yudin I.B. Experience in the synthesis of diamond from a supersonic microwave plasma jet. *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*, 2019, vol. 7 (2), pp. 131–137. DOI: 10.1615/InterfacPhenom HeatTransfer.2019031315.
- Rebrov A.K., Emelyanov A.A., Plotnikov M.Yu., Timoshenko N.I., Yudin I.B. Synthesis of diamond from a high-velocity microwave plasma flow. *Doklady Physics*, 2020, vol. 65 (1), pp. 23–25. DOI: 10.1134/S1028335820010127. Translated from *Doklady Rossiiskoi akade-*

mii nauk. Fizika, tekhnicheskie nauki, 2020, vol. 490, no. 1, pp. 48–51. DOI: 10.31857/S2686740020010198.

- 21. Emelyanov A.A., Pinaev V.A., Plotnikov M.Yu., Rebrov A.K., Timoshenko N.I., Yudin I.B. Effect of methane flow rate on gas-jet MPCVD diamond synthesis. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2022, vol. 55 (20), p. 205202. DOI: 10.1088/1361-6463/ac526e.
- Rebrov A.K., Emel'yanov A.A., Pinaev V.A., Plotnikov M.Yu., Timoshenko N.I., Yudin I.B. Gas-jet synthesis of diamond coatings from a H₂+CH₄+Ar mixture activated in a microwave discharge. *Doklady Physics*, 2022, vol. 67, pp. 197–200. DOI: 10.1134/S1028335822070047. Translated from *Doklady Rossiiskoi akademii nauk*. *Fizika, tekhnicheskie nauki*, 2022, vol. 505, no. 1, pp. 45–49.
- Podlesnyi S.N., Kartashov I.A., Tarkov S.M., Volodin V.A., Popov V.P., Kupriyanov I.N., Pal'yanov Yu.N., Emel'yanov A.A., Timoshenko N.I., Rebrov A.K. [Quantum sensors of physical fields on ensembles of NV centers in diamond nanostructures]. *Fotonika 2021* [Photonika 2021]. Abstracts, October 4–8, 2021, Novosibirsk, p. 35. DOI: 10.34077/RCSP2021-35. (In Russian).
- Tarkov S.M., Antonov V.A., Podlesny S.N., Yemelyanov A.A., Rebrov A.K., Popov V.P., Volodin V.A., Vdovin V.I., Timoshenko N.I., Yudin I.B., Nadolinny V.A. Applicability of gas-jet MPCVD polycrys-talline diamond films on silicon with NV centers in quantum magnetometry. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2119, p. 012120. DOI: 10.1088/1742-6596/2119/1/012120.
- Yelisseyev A.P., Emelyanov A.A., Rebrov A.K., Timoshenko N.I., Yudin I.B., Gromilov S.A., Titov A.T., Plotnikov M.Yu. Structure of a diamond deposited from microwave plasma by a new gas-jet method. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 2021, vol. 94, p. 105386.
- Fedoseeva Yr.V., Gorodetskiy D.V., Makarova A.A., Yudin I.B., Timoshenko N.I., Plotnikov M.Yu., Emelyanov A.A., Rebrov A.K., Okotrub A.V. Influence of the temperature of molybdenum substrates on the structure of diamond coatings obtained by chemical vapor deposition from a high-speed microwave plasma jet. *Journal of Structural Chemistry*, 2021, vol. 62, pp. 153–162. DOI: 10.1134/S0022476621010182. Translated from *Zhurnal strukturnoi khimii*, 2021, vol. 62, no. 1, pp. 157–166.
- 27. Emelyanov A.A., Plotnikov M.Yu., Timoshenko N.I., Yudin I.B. Effective cooling of substrates with low thermal conductivity under conditions of gas-jet MPCVD diamond synthesis. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2119, p. 012119. DOI: 10.1088/1742-6596/2119/1/012119.
- Liu M.N., Bian Y.B., Zheng S.J., Zhu T., Chen Y.G., Chen Y.L., Wang J.S. Growth and mechanical properties of diamond films on cemented carbide with buffer layers. *Thin Solid Films*, 2015, vol. 584, pp. 165–169. DOI: 10.1016/j.tsf.2015.01.021.
- Rebrov A.K., Batraev I.S., B'yadovskii T.T., Gladkikh E.V., Useinov A.S., Khomyakov M.N. gas jet deposition of diamond onto a steel surface covered by a tungsten carbide or molybdenum layer. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2019, vol. 60, pp. 1077–1087. DOI: 10.1134/S0021894419060130. Translated from *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 2019, vol. 60, no. 6, pp. 118–129.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Емельянов Алексей Алексеевич – родился в 1942 году, канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник, лаборатория разреженных газов, ИТ СО РАН. Область научных интересов: газоструйный синтез алмазов, экспериментальные исследования свойств алмазных покрытий. Опубликовано 95 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 1. E-mail: alemelyanov@gmail.com).

Emelyanov Alexey Alexeevich (b. 1942), Candidate of Sciences (Eng.), lead researcher, laboratory of rarefied gases, IT SB RAS. His research interests are currently focused on gas-jet synthesis of diamonds and experimental studies of the properties of diamond coatings. He is the author of 95 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Av., Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: alemelyanov@gmail.com).



Плотников Михаил Юрьевич – родился в 1965 году, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, лаборатория разреженных газов, ИТ СО РАН. Область научных интересов: газоструйный синтез алмазов, численное моделирование, динамика разреженного газа. Опубликовано 90 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 1. E-mail: plotnikov@itp.nsc.ru).

Plotnikov Mikhail Yur'evich (b. 1965), Candidate of Sciences (Phys. & Math.), lead researcher, laboratory of rarefied gases, IT SB RAS. His research interests are currently focused on gas-jet synthesis of diamonds, numerical modeling and dynamics of a rarefied gas. He is the author of 90 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Prospekt, Novosibirsk, 630090, Russia. Email: plotnikov@itp.nsc.ru).



Тимошенко Николай Иванович – род. в 1947 году, канд. физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник лаборатории разреженных газов ИТ СО РАН. Область научных интересов: динамика разреженных газов, CVD-покрытия, газоструйный синтез алмазов. Опубликовано более 100 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 1. E-mail: vika@itp.nsc.ru).

Timoshenko Nikolay Ivanovich (b. 1947) – Candidate of Sciences (Phys. & Math.), Associate Professor, Senior Researcher from the Rarefied Gas Laboratory of IT SB RAS. Research interests: rarefied gas dynamics, CVD-coatings, gas-jet synthesis of diamonds (Address: 1, Ac. Lavrentiev Prospekt, Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: vika@itp.nsc.ru).



Юдин Иван Борисович – родился в 1979 году, младший научный сотрудник Института теплофизики СО РАН, лаборатория разреженных газов. Область научных интересов – численное моделирование, динамика разреженного газа, осаждение алмазных покрытий из газовой фазы. Опубликовано более 30 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 1. E-mail: yudinib@gmail.com).

Yudin Ivan Borisovich (b. 1979), junior researcher, Institute of Thermophysics of the SB RAS in the Laboratory of rarefied gas dynamics. The area of his scientific interests is numerical simulation, rarefied gas dynamics, and the growth of diamond films from the gas phase. More than 30 scientific papers have been published. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Prospekt, Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: yudinib@gmail.com).

> Статья поступила 17 мая 2023 г. Received May 17, 2023

To Reference:

Emelyanov A.A., Plotnikov M.Yu., Timoshenko N.I., Yudin I.B. Gas-jet MPCVD synthesis of diamond coatings on substrates of various materials. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 3 (60), pp. 7–19. DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-7-19.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль–сентябрь

№ 3 (60)

— ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ =

УДК 532.6:546.22

2023

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ФУНКЦИИ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ СЕРЕБРА С ПРИМЕНЕНИЕМ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

Д.Г. Цыдыпов^{1,2}, А.В. Номоев^{1,2}, Б.З. Гармаев¹

¹Институт физического материаловедения СО РАН ²Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова

Известно, что работоспособность микроэлектронных устройств на основе наноструктур серебра зависит от их теплофизических свойств. Поэтому актуально исследование теплофизических свойств наноструктур серебра в зависимости от их размеров и структуры. В данной работе изучена термическая стабильность сферических наночастиц серебра с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. В ходе работы были получены температурные зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастиц серебра при изменении размера наночастицы для различных потенциалов, отвечающих методу «погруженного атома». Используя численные методы обработки данных, включая метод локальных регрессий LOESS и нахождение первой производной температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы, определены значения температур начала и завершения плавления. Также построены и проанализированы размерные зависимости температуры плавления, удельной теплоты плавления наночастицы серебра для различных потенциалов «погруженного атома». Определены потенциалы «погруженного атома», которые обеспечивают лучшее согласие с табличными значениями макроскопических температуры плавления и удельной теплоты плавления. Кроме того, построена и проанализирована функция радиального распределения для наночастицы серебра при различных температурах и для разных размеров наночастицы.

Ключевые слова: наночастица серебра, термостабильность, температура плавления, удельная теплота плавления, функция радиального распределения, метод молекулярной динамики.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-20-31

Введение

Как правило, наночастицы серебра имеют диаметр от 1 до 100 нм и обладают уникальными свойствами, которые отличаются от свойств объемного серебра [1]. Наночастицы серебра применяют в чернилах, микроэлектронике и медицине [2].

Метод молекулярной динамики (МД) – это метод, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения [3].

Для описания взаимодействия между атомами в веществе используются межатомные потенциалы [4]. Одним из методов для описания межатомного взаимодействия является метод «погруженного атома» (embedded atom method, EAM) [5]. Этот метод основан на идее теории функционала плотности. Основываясь на идее теории функционала плотности, полная электронная энергия произвольно упорядоченных ядер может быть записана как однозначный функционал полной элек-

© 2023 Цыдыпов Д.Г., Номоев А.В., Гармаев Б.З.

Работа выполнена по проекту государственного задания № 0270-2021-0002 «Физические характеристики, особенности строения, фазовые диаграммы и функциональные свойства композитных структур и материалов».

тронной плотности. В данном методе полная электронная плотность в металле представляется в виде линейной суперпозиции вкладов отдельных атомов.

В методе «погруженного атома» энергия одного атома в атомной структуре определяется выражением [4]

$$E_i = F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \phi_i$$

$$\rho_i = \sum_j \rho_j ,$$

где *F* – функция «погружения»; ρ_i – плотность электронов в *i*-м месте; ϕ – энергия парного взаимодействия.

Таким образом, энергия каждого атома системы определяется как сумма энергии парного взаимодействия этого атома с другими атомами системы плюс функция «погружения». Функция «погружения» учитывает влияние соседних атомов на парное взаимодействие. Функция «погружения» зависит от полной электронной плотности всех атомов, кроме одного атома, для которого рассчитывается энергия.

1. Реализация моделирования МД-методом

Исследовались сферические наночастицы серебра с различными диаметрами, обладающие гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой. В ходе моделирования в качестве потенциалов для описания взаимодействий между атомами серебра использовались: ЕАМ-потенциал для металлов с ГЦК кристаллической решеткой, разработанный Шенгом и соавторами [6]; ЕАМ-потенциал для системы медь/серебро, применимый для наночастиц серебра, разработанный Уильямсом и соавторами [7]; ЕАМ-потенциал, разработанный Чжоу и соавторами, который также применим для наночастиц серебра [8].

Для уравновешивания и нагрева системы до требуемой температуры использовался термостат Нозе-Гувера (канонический ансамбль NVT). При таком методе моделирования система может обмениваться энергией с окружающей средой (термостатом). Временной шаг был установлен равным 1 фс.

Сначала выполнялось уравновешивание наночастицы при 300 К в течение 500 пс. Затем был произведен нагрев наночастицы серебра от 300 К до 1600 К со скоростью нагрева 2,6 К/пс, для чего потребовалось моделирование длительностью в 500 пс, что является достаточным для наблюдения за поведением структурных и фазовых изменений наночастицы.

2. Результаты и обсуждение

Рассмотрим термическую стабильность наночастиц серебра. В ходе работы были получены температурные зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы серебра при изменении размера наночастицы для различных потенциалов, отвечающих методу «погруженного атома», и обработаны в компьютерной программе Origin. На рис. 1, *а* представлена температурная зависимость потенциальной части внутренней энергии наночастицы серебра до применения метода локальных регрессий LOESS для сглаживания зависимости. Метод LOESS позволяет сгладить ряд значений, используя простую линейную либо полиномиальную зависимость *y* от *x* [9]. На рис. 1, *б* показана температурная зависимость потенциальной части внутренней энергии наночастицы после применения в программе Origin метода LOESS.



Рис. 1 – Температурная зависимость потенциальной части внутренней энергии наночастицы до применения метода LOESS (*a*) и после применения метода LOESS (б)



В ходе работы температуру плавления определяли по скачку температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы. В качестве температуры плавления принималось значение, соответствующее середине интервала между температурами начала и завершения плавления.

После применения метода LOESS в программе Origin проводилось построение графика производной первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы для дальнейшего определения значений температур начала T_1 и завершения T_2 плавления.

На рис. 2, *а* показан график производной первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы до применения метода LOESS, с помощью которого невозможно определить значения температур начала и завершения плавления. Большой статистический разброс можно объяснить тем, что наночастица, состоящая из атомов, не успевает прийти в равновесное состояние в процессе ее нагрева. Шаг по температуре – неравномерный, изменяется в интервале от 0,3 до 12,1 К, максимальный перепад по энергии на одном шаге равен 353,1 эВ/К.



Рис. 2 – Производная первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы до применения метода LOESS (*a*) и после применения метода LOESS (*б*). T_1 и T_2 – температуры начала и завершения плавления соответственно

Fig. 2 – The first order derivative of the temperature dependence of the potential part of the internal energy of a nanoparticle before the LOESS method (*a*) and after the LOESS method (δ). *T*₁ and *T*₂ are the temperatures of the beginning and end of melting, respectively

На рис. 2, б представлен график производной первого порядка температурной зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы после применения метода LOESS. Использование метода LOESS позволяет отфильтровать тепловые флуктуации и определить значения температур начала T_1 и завершения T_2 плавления. Значения T_1 и T_2 определялись по резкому изменению производной.

Для потенциалов [6], [7] и [8] были рассчитаны температурные зависимости потенциальной части внутренней энергии наночастицы серебра для различных размеров (радиус от 1,5 до 6,5 нм) наночастицы и определена температура плавления для каждого размера наночастицы для дальнейшего построения размерных зависимостей температуры плавления для каждого используемого EAMпотенциала.

Зависимость температуры плавления сферических наночастиц от размера определяется известной формулой Томсона [10]:

$$T_m = T_0 \left(1 - \frac{2\sigma_{sl}\upsilon_s}{\lambda_0} \frac{1}{R} \right),\tag{1}$$

где T_m – температура плавления наночастицы; T_0 – макроскопическое значение температуры плавления твердой фазы; λ_0 – макроскопическое значение удельной теплоты плавления твердой фазы; R – радиус частицы; σ_{sl} – межфазное натяжение на границе раздела кристалла с собственным расплавом; υ_s – удельный объем твердой фазы. Таким образом, формула Томсона (1) предсказывает линейную зависимость между температурой плавления наночастицы и ее обратным радиусом (1/R).

Основываясь на результатах, полученных МД-методом, можно найти макроскопическое значение температуры плавления серебра для каждого используемого ЕАМ-потенциала, проведя линейную экстраполяцию зависимостей температуры плавления от обратного радиуса (1/R) к $R \to \infty$ (рис. 3).

Макроскопическое значение температуры плавления серебра $T_m^{(\infty)} = 1382$ К при использовании потенциала [6] (отклонение от табличного значения (1235 К) составляет 11,9 %). При использовании потенциала [7] $T_m^{(\infty)} = 1409$ К (отклонение составляет 14,1 %). Для потенциала [8] $T_m^{(\infty)} = 1256$ К (отклонение составляет 1,7 %). Таким образом, лучшее совпадение с табличным значением макроскопической температуры плавления наблюдается при использовании потенциала [8]. Разброс в значениях макроскопической температуры плавления, определенных при использовании потенциалов [6], [7] и [8], можно объяснить различием полученных параметров потенциалов, входящих в состав трех функций: функцию «погружения» F, плотность электронов ρ и энергию парного взаимодействия ϕ .

Еще одной важной характеристикой для исследования термической стабильности наночастиц является теплота плавления. Способ определения теплоты плавления описан в [12–15].

В данной работе для нахождения удельной теплоты плавления использовалось следующее выражение:

$$\lambda = \frac{\Delta U}{m},\tag{2}$$

где ΔU – энергия, необходимая для разрушения кристаллической структуры при температуре, соответствующей началу плавления; *m* – масса частицы.



Рис. 3 – Зависимости температуры плавления наночастицы серебра от обратного радиуса (1/*R*) для различных ЕАМ-потенциалов. Штриховой линии соответствует табличное значение макроскопической температуры плавления серебра *T*₀ = 1235 К [11]

Fig. 3 – Dependences of the melting temperature of a silver nanoparticle on the reciprocal radius (1/R) for various EAM potentials. The dashed line corresponds to the tabular value of the macroscopic melting temperature of silver $T_0 = 1235$ K [11]

На рис. 4 представлены рассчитанные с использованием формулы (2) зависимости удельной теплоты плавления наночастицы серебра от обратного радиуса (1/*R*) с использованием различных ЕАМ-потенциалов.

Ранее вывод о том, что зависимость теплоты плавления от обратного радиуса (1/R) близка к линейной, был сделан в работах [12–16]. Поэтому, чтобы найти макроскопическое значение удельной теплоты плавления серебра для каждого используемого EAM-потенциала, проведена линейная экстраполяция зависимостей удельной теплоты плавления от обратного радиуса (1/R) к $R \to \infty$ (рис. 4).

Макроскопическое значение удельной теплоты плавления серебра $\lambda^{(\infty)} = 74,9$ кДж/кг при использовании потенциала [6] (отклонение от табличного значения (87,3 кДж/кг [11]) составляет 14,2 %). Для потенциала [7] $\lambda^{(\infty)} = 70,8$ кДж/кг (отклонение равно 18,9 %). При использовании потенциала [8] $\lambda^{(\infty)} = 66,7$ кДж/кг (отклонение равно 23,6 %). Таким образом, параметры потенциала [6] обеспечивают лучшее согласие с табличным значением макроскопической удельной теплоты плавления.

На рис. 5 показана функция радиального распределения для наночастицы серебра с радиусом R = 2,5 нм при разных температурах при использовании потенциала [6]. При температуре 300 К функция радиального распределения имеет острые пики, соответствующие ближайшим и более удаленным атомам. С повышением температуры пики функции радиального распределения размываются, так как структура становится менее упорядоченной. Размытие пиков означает, что уменьшается вероятность появления атома в координационных сферах. Для потенциалов [7] и [8] вид функции радиального распределения для наночастицы серебра с радиусом R = 2,5 нм при разных значениях температуры не отличается от вида функции радиального распределения.



Рис. 4 – Зависимости удельной теплоты плавления наночастицы серебра от обратного радиуса (1/*R*) для различных ЕАМ-потенциалов. Штриховой линии соответствует табличное значение макроскопической удельной теплоты плавления серебра $\lambda_0 = 87,3$ кДж/кг [11]

Fig. 4 – Dependences of the specific heat of fusion of a silver nanoparticle on the reciprocal radius (1/R) for various EAM potentials. The dashed line corresponds to the tabular value of the macroscopic specific heat of fusion of silver $\lambda_0 = 87.3$ kJ/kg [11]



Рис. 5 – Функция радиального распределения для наночастицы серебра с радиусом R = 2,5 нм для потенциала [6] при разных температурах: 300 К (наночастица находится в твердом состоянии), 1172 К (в процессе плавления наночастицы), 1542 К (наночастица находится в жидком состоянии)

Fig. 5 – The radial distribution function for a silver nanoparticle with radius R = 2.5 nm for the potential [6] at different temperatures: 300 K (the nanoparticle is in the solid state), 1172 K (in the process of melting the nanoparticle), 1542 K (the nanoparticle is in the liquid state)

На рис. 6 представлена функция радиального распределения для разных размеров наночастицы серебра при температуре T = 300 К при использовании потенциала [6]. При уменьшении размера наночастицы наблюдается уменьшение высоты пиков функции радиального распределения, начиная со второй координационной сферы. Известно [17], что чем меньше размер наночастицы, тем сильнее влияние поверхностного натяжения на наноструктуру. Это не только приводит к тому, что поверхностные атомы становятся менее упорядоченными, но и влияет на подповерхностные атомы. Соответственно увеличивается доля неупорядоченных атомов, и упорядоченность наноструктуры становится хуже. Для потенциалов [7] и [8] функция радиального распределения для разных размеров наночастицы серебра при температуре T = 300 К имеет такой же вид, как и у функции радиального распределения для потенциала [6].



Рис. 6 – Функция радиального распределения для разных размеров наночастицы серебра (*R* = 1 нм; 1,5 нм; 5 нм) при температуре *T* = 300 К при использовании потенциала [6]

Fig. 6 – The radial distribution function for different sizes of silver nanoparticles (R = 1 nm; 1.5 nm; 5 nm) at temperature T = 300 K when using the potential [6]

Заключение

В данной работе была изучена термостабильность наночастицы серебра для разных размеров наночастицы с использованием различных ЕАМ-потенциалов с помощью моделирования МД-методом. Применение численных методов обработки данных позволило определить значения температур начала и завершения плавления. В ходе работы были получены размерные зависимости температуры плавления наночастицы для разных ЕАМ-потенциалов; установлено, что наименьшее отклонение (1,7 %) от табличного значения макроскопической температуры плавления серебра [11] наблюдается при использовании потенциала [8]. Также в настоящей работе были получены размерные зависимости удельной теплоты плавления наночастицы для различных ЕАМ-потенциалов; определено, что наименьшее отклонение (14,2 %) от табличного значения макроскопической удельной теплоты плавления серебра [11] наблюдается при использовании потен-

циала [6]. Полученные в настоящей работе результаты показывают, что нужно тщательно подбирать потенциал для наночастиц. Так, потенциал [8] обеспечивает лучшее согласие с табличным значением макроскопической температуры плавления серебра, но также дает наибольшее отклонение от табличного значения макроскопической удельной теплоты плавления серебра. Также в ходе работы построена функция радиального распределения для наночастицы серебра при разных температуры пики функции радиального распределения для разных размываются. Кроме того, построена функция радиального распределения для разных размываются. Кроме того, построенным зависимостям видно, что при уменьшении размера наночастицы наблюдается уменьшение высоты пиков функции радиального распределения, начиная со второй координационной сферы.

ЛИТЕРАТУРА

- Silver nanoparticles: properties, synthesis, characterization, applications and future trends / S.T. Galatage, A.S. Hebalkar, S.V. Dhobale, O.R. Mali, P.S. Kumbhar, S.V. Nikade, S.G. Killedar // Silver micro-nanoparticles – properties, synthesis, characterization, and applications / ed. by S. Kumar, P. Kumar, C.S. Pathak. – London: IntechOpen, 2021. – Ch. 4. – P. 1–19. – DOI: 10.5772/intechopen.99173.
- Tran Q.H., Nguyen V.Q., Le A. Silver nanoparticles: synthesis, properties, toxicology, applications and perspectives // Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology. 2018. Vol. 4 (3). P. 1–20. DOI: 10.1088/2043-6262/4/3/033001.
- 3. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23, № 9. – С. 105–119.
- 4. Chistyakova N.V., Tran T.M.H. A study of the applicability of different types of interatomic potentials to compute elastic properties of metals with molecular dynamics methods // AIP Conference Proceedings. 2016. Vol. 1772: Prospects of Fundamental Sciences Development (PFSD-2016): XIII International Conference of Students and Young Scientists, 26–29 April 2016, Tomsk, Russia: proceedings. P. 060019-1–060019-7. DOI: 10.1063/ 1.4964599.
- 5. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications // Materials Science Reports. 1993. Vol. 9 (7–8). P. 251–310. DOI: 10.1016/0920-2307(93)90001-U.
- 6. Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals / H. Sheng, M.J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, M.W. Chen // Physical Review B. – 2011. – Vol. 83 (13). – P. 134118-1–134118-20. – DOI: 10.1103/PhysRevB.83.134118.
- Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C. An embedded-atom potential for the Cu–Ag system // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2006. Vol. 14 (5). P. 817–833. – DOI: 10.1088/0965-0393/14/5/002.
- Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers // Physical Review B. – 2004. – Vol. 69 (14). – P. 144113-1– 144113-10. – DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
- 9. OriginLab Corporation: website. URL: https://www.originlab.com/doc/originhelp/smoothing (accessed: 08.09.2023).
- Thomson W. LX. On the equilibrium of a vapour at a curved surface of liquid // Philosophical Magazine. Series 4. – 1871. – Vol. 42 (282). – P. 448–452. – DOI: 10.1080/ 14786447108640606.
- 11. Енохович А.С. Справочник по физике. М.: Просвещение, 1978. 415 с.
- Расчет размерных зависимостей теплоты плавления наночастиц металлов / Н.Ю. Сдобняков, П.В. Комаров, А.Ю. Колосов, Н.В. Новожилов, Д.Н. Соколов, Д.А. Кульпин // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2013. – Т. 15, № 3. – С. 337–344.

- Соколов Д.Н., Сдобняков Н.Ю., Комаров П.В. Расчет размерных зависимостей теплоты плавления наночастиц металлов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2011. – Вып. 3. – С. 229–238.
- 14. О размерной зависимости теплоты плавления металлических нанокластеров / В.М. Самсонов, Н.Ю. Сдобняков, С.А. Васильев, Д.Н. Соколов // Известия РАН. Серия физическая. – 2016. – Т. 80, № 5. – С. 547–550. – DOI: 10.7868/S0367676516050161.
- 15. Молекулярно-динамическое исследование размерной зависимости теплоты плавления металлических нанокластеров / В.М. Самсонов, С.А. Васильев, А.Г. Бембель, Т.Е. Самсонов, В.Л. Скопич // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, вып. 12. – С. 2289–2292.
- 16. Расчет размерных зависимостей теплот плавления и кристаллизации наночастиц металлов / Н.Ю. Сдобняков, Д.Н. Соколов, В.С. Мясниченко, А.Н. Базулев // Физикохимические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2014. – Вып. 6. – С. 342–348.
- Melting behavior of Ag nanoparticles and their clusters / D. Feng, Y. Feng, S. Yuan, X. Zhang, G. Wang // Applied Thermal Engineering. – 2017. – Vol. 111 (7). – P. 1457–1463. – DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2016.05.087.

DETERMINATION OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES AND THE RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION OF A SILVER NANOPARTICLE USING NUMERICAL METHODS

Tsydypov D.G.^{1,2}, Nomoev A.V.^{1,2}, Garmaev B.Z.¹

¹Institute of Physical Material Science, SB RAS, Ulan-Ude, Russia ²Buryat State University, Ulan-Ude, Russia

The performance of microelectronic devices based on silver nanostructures depends on their thermophysical properties. Therefore, it is important to study the thermophysical properties of silver nanostructures depending on their size and structure. In this work, the thermal stability of spherical silver nanoparticles was studied using computer simulation by the molecular dynamics method. In the course of this work, the temperature dependences of the potential part of the specific internal energy of silver nanoparticles were obtained with a change in the size of the nanoparticle for various potentials corresponding to the embedded atom" method. Using numerical data processing methods, the temperatures of the beginning and end of melting were determined. Also, size dependences of the melting temperature and specific heat of fusion of silver nanoparticles were plotted and analyzed for different potentials of the "embedded atom". Potentials that provide the best agreement with the tabular values of the macroscopic melting temperature and specific heat of fusion for a silver nanoparticle was constructed and analyzed at different temperatures and for different sizes of the nanoparticle was constructed and analyzed at different temperatures and for different sizes of the nanoparticle.

Keywords: silver nanoparticle, thermal stability, melting temperature, specific heat of fusion, radial distribution function, molecular dynamics method.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-20-31

REFERENCES

- Galatage S.T., Hebalkar A.S., Dhobale S.V., Mali O.R., Kumbhar P.S., Nikade S.V., Killedar S.G. Silver nanoparticles: properties, synthesis, characterization, applications and future trends. *Silver micro-nanoparticles properties, synthesis, characterization, and applications*. London, IntechOpen, 2021, ch. 4, pp. 1–19. DOI: 10.5772/intechopen.99173.
- Tran Q.H., Nguyen V.Q., Le A. Silver nanoparticles: synthesis, properties, toxicology, applications and perspectives. *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology*, 2018, vol. 4 (3), pp. 1–20. DOI: 10.1088/2043-6262/4/3/033001.

- Podryga V.O. Molecular dynamics method for simulation of thermodynamic equilibrium. Mathematical Models and Computer Simulations, 2011, vol. 3 (3), pp. 382–388. DOI: 10.1134/S2070048211030112. Translated from Matematicheskoe modelirovanie, 2011, vol. 23, no. 9, pp. 105–119.
- Chistyakova N.V., Tran T.M.H. A study of the applicability of different types of interatomic potentials to compute elastic properties of metals with molecular dynamics methods. *AIP Conference Proceedings*, 2016, vol. 1772, pp. 060019-1–060019-7. DOI: 10.1063/ 1.4964599.
- Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications. *Materials Science Reports*, 1993, vol. 9 (7–8), pp. 251–310. DOI: 10.1016/0920-2307(93)90001-U.
- Sheng H., Kramer M.J., Cadien A., Fujita T., Chen M.W. Highly optimized embedded-atommethod potentials for fourteen fcc metals. *Physical Review B*, 2011, vol. 83 (13), pp. 134118-1–134118-20. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.134118.
- Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C. An embedded-atom potential for the Cu–Ag system. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2006, vol. 14 (5), pp. 817– 833. DOI: 10.1088/0965-0393/14/5/002.
- Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*, 2004, vol. 69 (14), pp. 144113-1– 144113-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
- OriginLab Corporation. Website. Available at: https://www.originlab.com/doc/originhelp/smoothing (accessed 08.09.2023).
- Thomson W. LX. On the equilibrium of a vapour at a curved surface of liquid. *Philosophical Magazine. Series* 4, 1871, vol. 42 (282), pp. 448–452. DOI: 10.1080/14786447108640606.
- Enokhovich A.S. Spravochnik po fizike [Handbook of physics]. Moscow, Prosveshchenie Publ., 1978ю 415 p.
- 12. Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V., Kolosov A.Yu., Novozhilov N.V., Sokolov D.N., Kulpin D.A. Raschet razmernykh zavisimostei teploty plavleniya nanochastits metallov [The calculation of the size dependencies of the heat of fusion for metal nanoparticles]. *Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granitsy = Condensed Matter and Interphases*, 2013, vol. 15, no. 3, pp. 337–344.
- 13. Sokolov D.N., Sdobnyakov N.Yu., Komarov P.V. Raschet razmernykh zavisimostei teploty plavleniya nanochastits metallov [The calculation of the size dependencies of the heat of fusion for metal nanoparticles]. *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov = Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2011, iss. 3, pp. 229–238.
- Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu., Vasilyev S.A., Sokolov D.N. On the size dependence of the heats of melting of metal nanoclusters. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2016, vol. 80 (5), pp. 494–496. DOI: 10.3103/S1062873816050166. Translated from *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya*, 2016, vol. 80, no. 5, pp. 547– 550. DOI: 10.7868/S0367676516050161.
- Samsonov V.M., Vasilyev S.A., Bembel A.G., Samsonov V.M., Skopich V.L. Molecular dynamics investigation of the size dependence of the heat of melting of metal nanoclusters. *Physics of the Solid State*, 2014, vol. 56 (12), pp. 2369–2373. DOI: 10.1134/ S1063783414120270. Translated from *Fizika tverdogo tela*, 2014, vol. 56, iss. 12, pp. 2289–2292.
- 16. Sdobnyakov N.Yu., Sokolov D.N., Myasnichenko V.S., Bazulev A.N. Raschet razmernykh zavisimostei teplot plavleniya i kristallizatsii nanochastits metallov [Calculation of the heat of fusion and the heat of freezing size dependencies for metal nanoparticles]. *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nano-struktur i nanomaterialov = Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, 2014, iss. 6, pp. 342–348.
- Feng D., Feng Y., Yuan S., Zhang X., Wang G. Melting behavior of Ag nanoparticles and their clusters. *Applied Thermal Engineering*, 2017, vol. 111 (7), pp. 1457–1463. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2016.05.087.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Цыдыпов Дамдин Галсанович – родился в 1997 году, инженер лаборатории физики композитных материалов ФГБУН «Институт физического материаловедения СО РАН», научный сотрудник лаборатории физики наносистем ФГБОУ ВО «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова». Область научных интересов: математическое моделирование, нанотехнологии и материалы. Опубликована одна научная работа. (Адрес: 670047, Россия, Улан-Удэ, Сахьяновой, 6. E-mail: damdinkatsydypov@gmail.com).

Tsydypov Damdin Galsanovich (b. 1997) – engineer, Laboratory of Physics of Composite Materials, Institute of Physical Materials Science SB RAS, a researcher, laboratory of physics of nanosystems, Buryat State University. His research interests are currently focused on mathematical modeling, nanotechnologies and materials. He is the author of 1 scientific paper. (Address: 6, Sakhyanova Street, Ulan-Ude, 670047, Russia. E-mail: damdinkatsydypov@gmail.com).



Номоев Андрей Валерьевич – родился в 1961 году, д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры общей и теоретической физики, заведующий лабораторией физики наносистем ФГБОУ ВО «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова», заведующий лабораторией физики композитных материалов ФГБУН «Институт физического материаловедения СО РАН». Область научных интересов: нанотехнологии и материалы. Опубликовано более 200 научных работ. (Адрес: 670047, Россия, Улан-Удэ, Сахьяновой, 6. E-mail: nomoevav@mail.ru).

Nomoev Andrey Valeryevich (b. 1961) – Doctor of Sciences (Phys. & Math.), associate professor, professor at the Department of General and Theoretical Physics; Head of the Laboratory; of Physics of Nanosystems, Buryat State University; Head of the Laboratory of Physics of Composite Materials, Institute of Physical Materials Science SB RAS. His research interests are currently focused on nanotechnologies and materials. He is the author and co-author of over 200 scientific papers. (Address: 6, Sakhyanova Street, Ulan-Ude, 670047, Russia. E-mail: nomoevav@mail.ru).



Гармаев Баир Заятуевич – родился в 1980 году, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории физики композитных материалов ФГБУН «Институт физического материаловедения СО РАН». Область научных интересов: нанотехнологии и материалы, радиофизика и цифровая обработка сигналов. Опубликовано более 70 научных работ. (Адрес: 670047, Россия, Улан-Удэ, Сахьяновой, 6. E-mail: bair.garmaev@gmail.com).

Garmaev Bair Zayatuyevich (b. 1980) – Candidate of Sciences (Phys. & Math.), senior researcher, laboratory of physics of composite materials, Institute of Physical Materials Science SB RAS. His research interests are currently focused on nanotechnologies and materials, radio physics and digital signal processing. He is the author and co-author of over 70 scientific papers. (Address: 6, Sakhyanova Street, Ulan-Ude, 670047, Russia. E-mail: bair.garmaev@gmail.com).

Статья поступила 4 июня 2023 г. Received June 4, 2023

To Reference:

Tsydypov D.G., Nomoev A.V., Garmaev B.Z. Opredelenie teplofizicheskikh svoistv i funktsii radial'nogo raspredeleniya nanochastitsy serebra s primeneniem chislennykh metodov [Determination of thermophysical properties and the radial distribution function of a silver nanoparticle using numerical methods]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 3 (60), pp. 20–31. DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-20-31.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

2023

июль–сентябрь

№ 3 (60)

= ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ =

УДК 53.46

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРАВЛЯЕМОГО СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИДНОГО КОМПОЗИТА С РАЗНЫМИ СПОСОБАМИ ОПИСАНИЯ КИНЕТИКИ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ

А.Г. Князева, М.А. Анисимова, Ю.А. Чумаков,

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

В настоящее время большой интерес вызывают подходы к моделированию синтеза новых материалов, для которых используют термины: многоуровневое (multilevel), многомасштабное (multiscale) и мультифизическое (multi-physical) моделирование. Цель настоящей работы состоит в сравнении двух подходов к моделированию синтеза покрытия из порошков Ті и Аl на подложке при условии управления процессом подвижным тепловым источником. Первый подход состоит в описании последовательности реакций на основе формальной кинетики. Результатом является состав композитного покрытия в зависимости от параметров подвижного источника тепла. Второй способ описания фазообразования приводит к двухуровневой модели, в которой разделение по уровням описания связано с разделением физических процессов. Задача макроуровня включает тепловую часть. Задача на мезоуровне дает фазовый состав в каждой точке макрообразца и решается в квазистационарном приближении. На основе решения задачи в каждой условной реакционной ячейке находится распределение концентраций алюминия и титана, положение границ раздела фаз и объемные доли всех фаз в ячейках в произвольный момент, соответствующие объемным долям фаз в каждой точке макрообразца. Получаемые объемные доли фаз переводятся в массовые концентрации интерметаллидов для сравнения с моделью первого типа. Показано, что оба подхода приводят к близким значениям среднеингральных концентраций фаз. Однако динамика фазообразования может значительно различаться.

Ключевые слова: управляемый синтез, многоуровневое моделирование, химическое тепловыделение, мезоячейка, кинетическая модель.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-32-45

Введение

Интерметаллиды на основе Ti-Al имеют ряд преимуществ перед традиционными сплавами титана. Это более высокий модуль упругости, меньшая плотность, лучшие механические свойства при высоких температурах [1, 2]. Существуют разные методы получения покрытий из смеси порошков Ti-Al, такие как электронно-лучевое плавление, селективное лазерное спекание (СЛС), самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС).

В случае селективного лазерного спекания процесс изготовления подразумевает не только жидкофазное спекание, но и синтез новых интерметаллических фаз, которых не было до смешивания. Этот метод позволяет изготавливать объемные детали с помощью пространственно-селективного лазерного облучения на поверхности порошковых композиций. Основной задачей любого синтеза с использованием лазерной энергии является подбор условий лазерного спекания, при которых физические явления будут находиться в динамическом равновесии, что приводит к установившимся режимам синтеза [3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда No 22-11-00100, https://rscf.ru/project/22-11-00100/.

^{© 2023} Князева А.Г., Анисимова М.А., Чумаков Ю.А.

В соответствии с фазовой диаграммой, в процессе синтеза ожидается получение стабильных интерметаллидных фаз титанатов алюминия: TiAl₃, TiAl, Ti₃Al в экзотермической реакции типа

$$x\mathrm{Ti} + y\mathrm{Al} \rightarrow \mathrm{Ti}_x\mathrm{Al}_v + Q$$
,

где Q – тепловой эффект реакции. Изучению механизмов реакций в системе Ti-Al и последовательности стадий посвящено большое число публикаций [4–7]. В условиях современных технологий появляются особенности.

Возможность контролируемого синтеза интерметаллидов показана, например, в [8, 9]. В работах [10, 11] показано, что на границе между расплавом Al и твердой фазой Ti при достижении температуры 645 °C в области контакта происходят реакции образования фаз Ti_xAl_y (где x и y = 1...3). В результате формируется каркас, состоящий из интерметаллида Al₃Ti с последующим синтезом фазы TiAl из несгоревших Al и Ti. Авторы [12] показали, что реакция начинается с плавления частиц Al, а плавление приводит к растворению частиц Ti и образованию зерен Al₃Ti. После того как жидкий Al израсходован, реакция протекает посредством твердофазной диффузии между твердым Al₃Ti и твердым Ti. Это приводит к формированию диффузионных слоев TiAl и Ti₃Al.

В [13] установлено, что когда температура выше точки плавления алюминия, между Ті и Al происходят реакции, в результате которых образуются различные фазы твердых растворов на основе Ti, фазы Ti3Al, TiAl, TiAl2 и TiAl3. По мере увеличения времени спекания твердый раствор на основе Ti, а также TiAl2 и TiAl3 постепенно исчезали, и окончательно в многослойной структуре формировались фазы Ti3Al и TiAl. Среди названных интерметаллических соединений лишь фазы TiAl и TiAl3 имеют широкую концентрационную область гомогенности. Это может свидетельствовать о некотором преимущественном зарождении таких фаз при активации диффузионных процессов на границе раздела биметаллических образцов титан-алюминий [14]. Особенности процессов структурообразования в данном случае определяются структурой равновесной диаграммы.

В целом, процесс синтеза включает в себя такие физические процессы, как теплообмен, фазовые превращения, изменение структуры и, как следствие, формирование напряженно-деформированного состояния. Для прогнозирования результатов синтеза и управления процессом структуро- и фазообразования необходимо как можно более точное описание кинетических и теплофизических закономерностей и формально-кинетических параметров многочисленных реакций, а при описании процесса синтеза с помощью суммарной схемы требуется установить структуру эффективной кинетической функции. Это позволит создавать модели для процессов СЛС, обладающие прогностическими свойствами. Подходы к моделированию синтеза покрытий в лазерных и электронно-лучевых технологиях могут быть основаны на идеях теории твердофазного горения или макрокинетики. Так, в работах [15, 16] разработана математическая модель процессов фазообразования в условиях теплового взрыва на основе равновесной диаграммы состояния системы Ti-Al. Предполагается диффузионный механизм реакций, приводящий к задачам с подвижными границами раздела фаз в элементарной ячейке. В [17, 18] при моделировании возможных объемных изменений в условиях объемного спекания учитывается стадийность реакций в системе Ti-Al в раках формальнокинетического подхода. И модели [17, 18], и модель синтеза покрытия [19] прогнозируют изменение состава при варьировании технологических условий. Авторы [20] предложили двумерную модель для теоретического описания СЛС порошковых составов, в которых может быть реализована реакция СВС. Помимо суммарной кинетики процессов CBC в модели учитываются условия сохранения управляемости процесса за счет соответствующего изменения параметров лазерного источника (плотность мощности, скорости лазерного сканирования, объемное поглощение и диаметр лазерного пятна).

Цель настоящей работы состоит в сравнении двух подходов к описанию кинетики фазообразования на примере модели управляемого синтеза покрытия из смеси порошков Ti и Al.

1. Постановка задачи

В простейшем случае образца в форме тонкой двухслойной пластины распределением температуры по толщине пластины пренебрегаем, считая ее «термически тонкой» и учитывая, что ее толщина много меньше ее длины и ширины; химическим взаимодействием покрытия и подложки также пренебрегаем. Принимаем, что внешний источник тепла однородно распределен вдоль одной из координатных осей на плоскости и движется с заданной скоростью V_x вдоль другой оси в этой же плоскости. Тогда тепловая часть задачи сводится к одномерному уравнению теплопроводности [21]

$$U\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(W \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{W_{ext} + W_{ch} - H(T)}{h_A + h_{B0}},$$
(1)

где

$$W = \lambda_A \frac{h_A}{h_A + h_{B0}} + \lambda_B \frac{h_B}{h_A + h_{B0}}$$

– эквивалентный коэффициент теплопроводности;

$$U = c_A \rho_A \frac{h_A}{h_A + h_{B0}} + c_B \rho_B \frac{h_B}{h_A + h_{B0}}$$

– эквивалентная объемная теплоемкость; λ_A , λ_B – коэффициенты теплопроводности; c_A , ρ_A , c_B , ρ_B – теплоемкости и плотности подложки (A) и покрытия (B); h_A , h_B – толщины слоев; W_{ext} – внешний источник тепла; W_{ch} – химическое тепловыделение; функция H(T) описывает потери тепла конвекцией и излучением

$$H(T) = \sigma \varepsilon \left(T^4 - T_e^4 \right) + \alpha_{eff} \left(T - T_e \right);$$

 α_{eff} – эффективный коэффициент теплоотдачи; σ – постоянная Стефана-Больц-

мана; є – показатель черноты; T_e – температура окружающей среды.

Внешний источник тепла задан следующей функцией:

$$W_{ext}(x, t) = q_0 \exp\left(-(x - V_x t)^2 / a_x^2\right),$$

где q_0 – максимальная плотность мощности эффективного источника; a_x – эффективный радиус электронного или лазерного луча; V_x – скорость его движения вдоль оси Ox.

Для описания плавления вводим минимальную и максимальную температуру плавления T_S и T_L . В этом интервале температуры доля жидкой фазы η_L изменяется по некоторому закону.
$$\eta_L = 0, T \le T_s$$

$$\begin{split} \eta_L = & \left(\frac{T-T_s}{T_L-T_s}\right)^2, \ T_s < T \leq T_L \ \text{ или } \ \eta_L = 1 - \left(\frac{T_L-T}{T_L-T_s}\right)^2, \ T_s < T \leq T_L \ , \\ & \eta_L = 1, T > T_L \ . \end{split}$$

В уравнение теплопроводности потери тепла на плавление входят в тепло-емкость:

$$c_B \rho_B = [c_B \rho_B]_0 + \rho_{B0} Q_m \left(\frac{\partial \eta_L}{\partial T}\right)_{Y_k}$$

где Q_m – эффективная теплота плавления; Y_k – концентрации компонентов (индекс *k* принимает значения Ti, Al, TiAl, TiAl, TiAl).

Заметим, что существуют и другие способы описания плавления. Важным является возможность выделения двухфазной зоны, где одновременно присутствует как твердая, так и жидкая фаза.

Функция химического тепловыделения зависит от способа описания фазообразования. Однако любой из способов ограничен недостатком или неопределенностью данных о кинетических параметрах.

В общем случае теплофизические свойства зависят от температуры, пористости и могут изменяться в ходе реакции, происходит усадка (изменение толщины порошкового слоя), что приводит к более сложному виду уравнения (1).

На торцах пластины источник и стоки тепла отсутствуют.

В начальный момент времени имеем: $T = T_0$.

2. Фазообразование

Первый способ моделирования фазообразования состоит в описании последовательности реакций на основе формальной кинетики. Для системы Ti-Al в кинетической модели учитываются следующие обратимые и необратимые стадии:

$$Ti + Al \Leftrightarrow TiAl; TiAl + 2Ti \Leftrightarrow Ti_3Al; TiAl + 2Al \Leftrightarrow TiAl_3;$$

 $2\text{Ti} + \text{TiAl}_3 \Rightarrow 3\text{TiAl}; 2\text{Al} + \text{Ti}_3\text{Al} \Rightarrow 3\text{TiAl}.$

Изменение концентраций компонентов со временем следует из решения кинетической задачи:

$$\frac{dY_k}{dt} = \sum_{(i)} v_{ik} \Phi_i \; ,$$

где Φ_k – скорости химических реакций, число которых r = 8; v_{ik} – стехиометрические коэффициенты для компонента k в реакции i.

Тогда

$$W_{ch} = \sum_{i=1}^{r} Q_i \Phi_i \quad \text{Дж/(см}^3 \text{с}),$$

где Q_i – тепловые эффекты реакций, принятые в модели постоянными.

Предполагается, что скорости реакций зависят от температуры по закону Аррениуса, а от концентраций – в соответствии с законом действующих масс. Самой серьезной проблемой в этом способе описания является отсутствие данных по энергиям активации и предэкспонентам или значительное различие в данных, полученных разными авторами [22].

Второй способ приводит к двухуровневой модели, в которой разделение по уровням описания связано с разделением физических процессов. Предполагается, что механизм реакций образования интерметаллидов является преимущественно диффузионным и имеет место на мезоуровне, где определяется условная мезо-ячейка, в центре которой располагается тугоплавкая частица (в рассматриваемом случае титан). При достижении температуры плавления алюминия (температура следует из решения макрозадачи) ускоряются диффузия и химические реакции. Модель мезоячейки в квазистационарном приближении реализована для условных ячеек двух типов – с формированием области, содержащей некоторый суммарный интерметаллид Ti_xAly и с последовательным образованием трех фаз Ti₃Al, TiAl, TiAl₃ (рис. 1). В любом случае для каждой реакционной ячейки, соответствующей некоторой точке макрообразца, мы приходим к задаче с подвижными границами в локальной (внутренней) системе координат. Таким образом, задача в целом становится двумерной.



Рис. 1 – Условные реакционные ячейки с образованием одной (a) и трех (б) фаз

Fig. 1 – Schematic reaction cells with the formation of one (a) and three (b) phases

Поскольку представление о реакционной ячейке является условным, для упрощения вычислений применяется приближенный подход к диффузионно-кинетическим задачам.

В общем случае задача мезоуровня включает уравнение диффузии

(

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_k \frac{\partial C_k}{\partial r} \right), \ k = p, ph, m.$$

В центре частицы выполняется условие симметрии; условия на границе учитывают наличие пределов растворимости и разрыв в диффузионных потоках, связанный с движением межфазных границ. На внешней границе установлено условие непроницаемости внешней границы выделенной мезоячейки радиусом R_m , размер которой определяется количеством матрицы, приходящимся на одну частицу с начальным радиусом R_p . Начальные значения положений границ раздела фаз близки к R_p .

В квазистационарном приближении задача нахождения распределения концентрации в областях заданных размеров решается простым интегрированием, как и в [23]. Условия для концентраций используются для нахождения констант интегрирования. Решение имеет вид:

$$C_{phi}(r) = -\frac{A_i}{r} + B_i,$$

$$A_i = \frac{(C'_i - C_i)(x_i x_{i+1})}{x_{i+1} - x_i}; \quad B_i = \frac{C'_i x_{i+1} - C_i x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

где *i* – номер фазы в переходном слое.

Для определения положения границ подставляем найденное решение для концентраций в граничные условия для потоков, что дает систему связанных обыкновенных дифференциальных уравнений. Зная положение границ, можно найти объемные доли фаз η_i.

В этом случае химическое тепловыделение рассчитывается по изменениям концентраций элементов и фаз, которые находятся в пределах мезобъема, или представительного объема.

$$W_{ch} = \sum_{i} Q_i \frac{d\eta_i}{dt}$$

Таким образом, в модели используются три вида концентраций: C_k – концентрация алюминия в фазах мезоячейки; η_k – объемные доли фаз в мезоячейке (эта величина зависит от времени и от положения ячейки в макрозадаче, т. е. от макроскопической координаты) и Y_k – массовые концентрации веществ (фаз). Сравнение двух подходов осуществляется по изменению массовых концентраций интерметаллидов (раздельно или в сумме) и по поведению температуры. Полученные при решении задач для мезоячеек η_i – объемные доли фаз пересчитываются в массовые концентрации Y_k для сравнения разных способов описания.

$$Y_k = \frac{\rho_{k0}\eta_k}{\sum_{(i)}\rho_{i0}\eta_i}$$

где ρ_{k0} – истинные плотности фаз.

Проблема недостаточности данных по коэффициентам диффузии (и невозможность их привязки к конкретным физическим механизмам и к реальной структуре), подвижностям, пределам растворимости и др. делает этот подход весьма условным. Использованные в расчетах параметры представлены в табл. 1.

Заметим, что кинетические свойства, необходимые как в первом, так и во втором подходе, подгоночными параметрами в прямом смысле не являются. Тепловые эффекты реакций оцениваются на основе термодинамических данных. Энергии активаций либо оцениваются на основе независимых подходов, либо определяются экспериментально. Точность методов невысока, поэтому для данных требуется корректировка. Самой серьезной является проблема оценки предэкспоненциальных факторов в законах Аррениуса для скоростей реакций и коэффициентов диффузии, которые включают в себя то, что в подобных моделях явно не учитываются размер частиц, структура и форма поверхностей, детальная структура реагентов, наличие дефектов и т. п. Эти особенности, а также условия проведения эксперимента, не уточняемые в публикациях, существенно влияют на характерное время диффузии и реакций. Для согласования характерных времен в модели можно включать параметр согласования. Более подробно процедура оценки данных описана, например, в [24, 25].

Таблица 1 / Table 1

Значения параметров, принятые в расчетах

Parameter values used in calculations

Параметры подложки / Substrate Parameters				
Толщина подложки / Substrate thickness h_A , см	0,7			
Толщина покрытия / Coating thickness h_B , см	0,1			
Размер образца / Sample size L, см	5			
Параметры процесса / Process Parameters				
Время / Time <i>t</i> , с	10			
Температура начальная / Initial temperature T ₀ , К	300			
Параметры источника / Source Parameters				
Плотность мощности / Power density q_0 , BT/см ³	15002500			
Радиус / Radius <i>ax</i> , см	0,1			
Скорость / Velocity V_x , см/с	0,5			

3. Результаты расчетов

В случае инертной задачи температура стационарного режима определяется мощностью внешнего источника (табл. 2). При учете химических процессов в величине температуры значительную роль играет тепловыделение химических реакций. В этом случае процесс превращения может идти самостоятельно и слабо зависит от плотности мощности источника тепла.

Таблица 2 / Table 2

Максимальная температура процесса для инертной задачи Maximum process temperature for the inert problem

<i>q</i> ₀ , Вт/см ³	1200	1500	2000	2500
<i>T</i> _{max} , K	1183	1652	1932	1941

Распределение температуры по координате в разные моменты для модели с химическими превращениями показано на рис. 2. Видим, что при использовании любого подхода для выбранного набора параметров имеет место выход на квазистационарный режим, которому соответствует некоторое квазистационарное значение температуры. Перегиб на кривых связан с началом плавления.

При низком значении плотности мощности подвижного источника тепла численные значения температуры для двух моделей различаются значительно. При $q_0 = 1,5 \cdot 10^3$ Вт/см³ квазистационарные значения температуры близки, однако для кинетической модели имеется участок медленного изменения температуры, связанный с наличием конкурирующих стадий, которые явно отсутствуют в двухуровневой модели. Величины среднеинтегральных концентраций (по всей длине образца конечных размеров) различаются. Из рис. 3, *а* можно заметить, что количество Ti3Al (и, как следствие, значения концентрации Ti) для формально кинетической и двухуровневой моделей отличаются значительно, в то время как концентрации TiAl, TiAl3 Al для разных подходов близки. Это связано как с неточными данными по формально кинетическим параметрам, так и с неопределенностью коэффициентов диффузии. Однако, используя некоторый произвол в выборе предэкспонентов (которые включают в себя все то, что явно не находит отражения в моделях) и принимая их за корректирующие множители, результаты можно согласовать более точно, чем это имеет место на рис. 3, *а*. Заметим, что для двухуровневой модели среднеинтегральные концентрации с учетом образования одной фазы Ti_xAl_y и трех фаз (TiAl, TiAl, TiAl3) близки (рис. 3, δ), что говорит о возможности замены трехфазной мезоячейки более простым вариантом.



Рис. 2 – Распределение температуры по координате при разных значениях плотности мощности источника для двух вариантов описания кинетики фазообразования в моменты:

l - t = 1 с; 2 - t = 3 с; 3 - t = 5 с; 4 - t = 7 с, 5 - t = 9 с. Пунктирные линии – формальнокинетический подход; сплошные линии – двухуровневая модель. Параметры модели представлены в табл. 1

Fig. 2 – Temperature distribution along the coordinate at different values of the source power density for two versions of the description phase formation kinetics at time points:

I - t = 1 s; 2 - t = 3 s; 3 - t = 5 s; 4 - t = 7 s, 5 - t = 9 s. Dashed lines are a formal-kinetic approach; solid lines are a two-level model. The model parameters are presented in Table 1

Распределения концентраций фаз вдоль образца для разных моментов (рис. 4) также свидетельствуют о качественном соответствии моделей – имеется выход на квазистационарный режим, имеется область неоднородного распределения концентраций во фронте волны реакции, скорости самостоятельного распространения реакции одинаковы.



Рис. 3 – Среднеинтегральные массовые концентрации исходных элементов и образовавшихся фаз для формально-кинетического подхода (пунктирная линия) и двухуровневой модели (сплошные линии) при плотности мощности источника q₀ = 1200 Вт/см³ (*a*); для двухуровневой модели с учетом образования одной и трех фаз при плотности мощности источника q₀ = 2000 Вт/см³ (б)

Fig. 3 – Average integral mass concentrations of initial elements and formed phases for formal-kinetic approach (dashed line) and two-level model (solid lines) at source power density $q_0 = 1200 \text{ W/cm}^3$ (*a*); for a two-level model, taking into account the formation of one and three phases at a source power density $q_0 = \text{W/cm}^3$ (*b*)



Рис. 4. – Распределение массовых концентраций исходных веществ и образовавшихся соединений при значении плотности мощности потока q₀ = 1200 Вт/см³ в моменты: 1 – t = 1 с; 2 – t = 3 с; 3 – t = 5 с; 4 – t = 7 с, 5 – t = 9 с. Пунктирные линии – двухуровневая модель с тремя фазами; сплошные линии – формально-кинетический подход

Fig. 4 – Distribution of mass concentrations of the initial substances and the formed compounds at the value of the flux power density $q_0 = 1200$ W/cm³ at the time points:

1 - t = 1 s; 2 - t = 3 s; 3 - t = 5 s; 4 - t = 7 s, 5 - t = 9 s. Dashed lines are a two-level model with three phases; solid lines are a formal kinetic approach

Заключение

Таким образом, в работе на примере системы Ti-Al осуществлено сравнение двух популярных подходов к описанию кинетики превращения. Показано, что формально-кинетический подход и двухуровневый подход с введением представления о реакционных ячейках эквивалентны. Неопределенность кинетических параметров в любом случае может быть компенсирована за счет перехода к моделям с редуцированной кинетикой или с глобальной реакцией (что используется в классической литературе) или к упрощенной условной реакционной ячейке. Построение двухуровневой модели сопряжено с увеличением размерности задачи. На настоящий момент более корректным представляется формально-кинетический подход.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Liu W., DuPont J.N. Fabrication of carbide-particle-reinforced titanium aluminide-matrix composites by laser-engineered net shaping // Metallurgical and Materials Transactions A. 2004. Vol. 35. P. 1133–1140. DOI: 10.1007/s11661-004-1016-5.
- Pimenova N.V., Starr T.L. Electrochemical and corrosion behavior of Ti-xAl-yFe alloys prepared by direct metal deposition method // Electrochimica Acta. – 2006. – Vol. 51. – P. 2042–2049.
- Surface Laser Sintering of exothermic powder compositions / I.V. Shishkovsky, V.I. Scherbakov, Y.G. Morozov, M.V. Kuznetsov, I.P. Parkin // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2008. – Vol. 91. – P. 427–436. – DOI: 10.1007/s10973-007-8353-8.
- Kattner U.R., Lin J.C., Chang Y.A. Thermodynamic assessment and calculation of the Ti-Al system // Metallurgical Transactions A. – 1992. – Vol. 23 (8). – P. 2081–2090.
- Naplocha K., Granat K. Reaction synthesis and microstructure of Al-Ti preform for composite reinforcing // Archives of Foundry Engineering. – 2008. – Vol. 8 (1). – P. 227–232.
- 6. Гуревич Л.М. Механизмы структурообразования при взаимодействии титана с расплавом алюминия // Известия ВолГТУ. 2013. № 6. С. 6–13.
- 7. Ковтунов А.И., Хохлов Ю.Ю., Мямин С.В. Особенности взаимодействия жидкого алюминия с титаном при формировании композиционных материалов // Вестник ПНИПУ. Машиностроение, материаловедение. 2020. Т. 22, № 4. С. 42–47. DOI: 10.15593/2224-9877/2020.4.06.
- 8. Шишковский И.В., Макаренко А.Г., Петров А.Л. Исследование условий интерметаллидов при селективном лазерном спекании порошковых композиций // Физика горения и взрыва. – 1999. – Vol. 35, № 2. – Р. 59–64.
- Исследование условий селективного лазерного спекания в порошковой системе Al-Ti / Ю.Г. Морозов, С.А. Нефедов, А.И. Панин, А.Л. Петров, И.В. Шишковский // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2002. – Т. 66, № 8. – С. 1156–1158.
- Shishkovsky I., Morozov Yu., Smurov I. Nanostructural self-organization under selective laser sintering of exothermic powder mixtures // Applied Surface Science. – 2009. – Vol. 255 (10). – P. 5565–5568.
- Microstructural evolution during self-propagating high-temperature synthesis of Ti-Al system / Y. Ma, Q. Fan, J. Zhang, J. Shi, G. Xiao, M. Gu // Journal of Wuhan University of Technology. Materials science edition. 2008. Vol. 23. P. 381–385. DOI: 10.1007/s11595-007-3281-6.
- Multilayered Ti-Al intermetallic sheets fabricated by cold rolling and annealing of titanium and aluminum foils / Y. Sun, Y. Zhao, D. Zhang, C. Liu, H. Diao, C. Ma // Transactions of Nonferrous Metals Society of China. – 2011. – Vol. 21 (8). – P. 1722–1727. – DOI: 10.1016/S1003-6326(11)60921-7.
- Формирование диффузионной зоны на границе раздела алюминий/титан / С.В. Макаров, М.Г. Олимов, В.А. Плотников, Ю.А. Орлова, Е.Е. Евтушенко, А.А. Шуткин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017. – Т. 14, № 4. – С. 475–479.

- 14. Кошелев К.Б. Исследование процессов структурообразования и саморазогрева в бинарной порошковой смеси Ti-Al в режиме статического теплового взрыва на основе диаграммы состояния // Известия Томского политехнического университета. – 2008. – Т. 312, № 2. – С. 44–47.
- 15. Евстигнеев В.В., Филимонов В.Ю., Кошелев К.Б. Математическая модель процессов фазообразования в бинарной порошковой смеси Ti-Al в режиме неадиабатического теплового взрыва // Физика горения и взрыва. – 2007. – Т. 43, № 2. – С. 52–57.
- Сорокова С.Н., Князева А.Г. Связанная модель спекания порошков системы Ti-TiAl₃ // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 314, № 2. – С. 96–101.
- 17. Сорокова С.Н., Князева А.Г. Математическое моделирование объемных изменений в процессе спекания порошков системы Ti-Al // Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11, № 6. С. 95–101.
- Sorokova S.N., Knyazeva A.G. Simulation of Coating phase structure formation in solid phase synthesis assisted by electron-beam treatment // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2008. – Vol. 42 (4). – P. 443–451.
- Shishkovsky I.V. Laser-controlled intermetallics synthesis during surface cladding // Laser Surface Engineering. – Woodhead Publishing, 2015. – Ch. 11. – P. 237–286. – DOI: 10.1016/B978-1-78242-074-3.00011-8.
- Knyazeva A.G., Anisimova M.A. Two-level model of composite synthesis on a substrate from a powder mixture of TiO₂ and Al. 1. Model description and simple examples // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2023. – Vol. 14 (3). – P. 73–102.
- Mukasyan A.S., Shuck C.E. Kinetics of SHS reactions: A review // International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. – 2017. – Vol. 26 (3). – P. 145–165. – DOI: 10.3103/S1061386217030049.
- Анисимова М.А., Князева А.Г. Оценка напряжений и деформаций в процессе формирования переходного слоя между частицей и матрицей // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2020. № 63. С. 60–71. DOI: 10.17223/19988621/63/6.
- Knyazeva A., Kryukova O. Modeling of multiphase composite synthesis on substrate taking into account the staging of chemical reactions // Applied Solid State Chemistry. 2019. Vol. 4 (1). P. 9–24.
- Knyazeva A.G., Kryukova O.N. Modeling Ti-Al-C-composite synthesis on a substrate under control of electron beam // Journal of Crystal Growth. – 2020. – Vol. 531. – P. 125349. – DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125349.

MODELING OF CONTROLLED SYNTHESIS OF INTERMETALLIC COMPOSITE WITH DIFFERENT DESCRIBING PHASE FORMATION KINETICS METHODS

Knyazeva A.G., Anisimova M.A., Chumakov Yu.A.

Institute of Strength Physics and Materials Science of SB RAS, Tomsk, Russia

Currently, multilevel (multilevel), multiscale (multiscale) and multiphysical (multi-physical) approaches to modeling the synthesis of new materials are of great interest. The purpose of this work is to compare two modeling approaches to the synthesis of coatings from Ti and Al powders on a substrate under the condition that the process is controlled by a moving heat source. The first approach consists in a formal description of the reactions sequence based on formal kinetics. The result is the composite coating composition depending on the parameters of the movable heat source. The second way of describing phase formation leads to a two-level model, in which the separation by description levels is associated with the separation of physical processes. The macrolevel problem includes the thermal part. The problem at the meso level gives the phase composition at each point of the macrosample and is solved in the quasi-stationary approximation. Based on the solution of the problem in each reaction cell, the distribution of aluminum and titanium concentrations, the phase boundaries position and the volume fractions of all phases in the cells at an arbitrary point in time, corresponding to the volume fractions of the phases at each point of the

macrosample, are found. The resulting volume fractions of the phases are converted into mass concentrations of intermetallic compounds for comparison with the model of the first type. It is shown that both approaches lead to close values of the average integral concentrations of the phases. However, the dynamics of phase formation can differ significantly.

Keywords: controlled synthesis, multilevel simulation, chemical heat release, mesocell, kinetic model.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-32-45

REFERENCES

- 1. Liu W., DuPont J.N. Fabrication of carbide-particle-reinforced titanium aluminide-matrix composites by laser-engineered net shaping. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2004, vol. 35. pp. 1133–1140. DOI: 10.1007/s11661-004-1016-5.
- 2. Pimenova N.V., Starr T.L. Electrochemical and corrosion behavior of Ti-xAl-yFe alloys prepared by direct metal deposition method. *Electrochimica Acta*, 2006, vol. 51, pp. 2042–2049.
- Shishkovsky I.V., Scherbakov V.I., Morozov Y.G., Kuznetsov M.V., Parkin I.P. Surface Laser Sintering of exothermic powder compositions. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2008, vol. 91, pp. 427–436. DOI: 10.1007/s10973-007-8353-8.
- 4. Kattner U.R., Lin J.C., Chang Y.A. Thermodynamic assessment and calculation of the Ti-Al system. *Metallurgical Transactions A*, 1992, vol. 23 (8), pp. 2081–2090.
- Naplocha K., Granat K. Reaction synthesis and microstructure of Al-Ti preform for composite reinforcing. *Archives of Foundry Engineering*, 2008, vol. 8 (1), pp. 227–232.
- Gurevich L.M. Mekhanizmy strukturoobrazovaniya pri vzaimodeistvii titana s rasplavom alyuminiya [Mechanisms of structure formation in the interaction of titanium with aluminum melt]. Izvestiya Volgogradskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta = Izvestia of Volgograd State Technical University, 2013, no. 6, pp. 6–13.
- Kovtunov A.I., Khokhlov Yu.Yu., Myamin S.V. Osobennosti vzaimodeistviya zhidkogo alyu-miniya s titanom pri formirovanii kompozitsionnykh materialov [Features of interaction between liquid aluminum and titanium in the formation of composite materials]. *Vestnik PNIPU. Mashinostroenie, materialovedenie = Bulletin PNRPU.* Mechanical engineering, materials science, 2020, vol. 22, no. 4, pp. 42–47, DOI: 10.15593/2224-9877/2020.2.06.
- Shishkovskii I.V., Makarenko A.G., Petrov A.L. Conditions for SHS of intermetallic compounds with selective laser sintering of powdered compositions. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 1999, vol. 35 (2), pp. 166–170. Translated from *Fizika goreniya i vzryva*, 1999, vol. 35, no. 2, pp. 59–64.
- Morozov Y.G., Nefedov S.A., Panin A.S., Petrov A.L., Shishkovsky I.V. Conditions of selective laser sintering in Al-Ti powdered system. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya = Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2002, vol. 66, no. 8, pp. 1156–1158. (In Russian).
- Shishkovsky I., Morozov Yu., Smurov I. Nanostructural self-organization under selective laser sintering of exothermic powder mixtures. *Applied Surface Science*, 2009, vol. 255 (10), pp. 5565–5568.
- Ma Y., Fan Q., Zhang J., Shi J., Xiao G., Gu M. Microstructural evolution during selfpropagating high-temperature synthesis of Ti-Al system. *Journal of Wuhan University of Technology. Materials science edition*, 2008, vol. 23, pp. 381–385. DOI: 10.1007/s11595-007-3281-6.
- Sun Y., Zhao Y., Zhang D., Liu C., Diao H., Ma C. Multilayered Ti-Al intermetallic sheets fabricated by cold rolling and annealing of titanium and aluminum foils. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2011, vol. 21 (8), pp. 1722–1727. DOI: 10.1016/S1003-6326(11)60921-7.
- Makarov S.V., Olimov M.G., Plotnikov V.A., Orlova Yu.A., Evtushenko E.E., Shutkin A.A. Formirovanie diffuzionnoi zony na granitse razdela alyuminii/titan [Formation of the diffusion zone at the aluminum/titanium interface]. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya = Basic Problems of Material Science*, 2017, vol. 14, no. 4, pp. 475–479.
- 14. Koshelev K.B. Issledovanie protsessov strukturoobrazovaniya i samorazogreva v binarnoi poroshkovoi smesi Ti-Al v rezhime staticheskogo teplovogo vzryva na osnove diagrammy

sostoyaniya [Studying the process of structure formation and self-heating in binary powder mixture Ti-Al in the mode of static thermal explosion on the basis of state diagram]. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta = Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*, 2008, vol. 312, no. 2, pp. 44–47.

- Evstigneev V.V., Filimonov V.Yu., Koshelev K.B. Mathematical model of phase-formation processes in a binary mixture of Ti and Al powders in the regime of a nonadiabatic thermal explosion. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2007, vol. 43 (2), pp. 170–175. Translated from *Fizika goreniya i vzryva*, 2007, vol. 43, no. 2, pp. 52–57.
- Sorokova S.N., Knyazeva A.G. Svyazannaya model' spekaniya poroshkov sistemy Ti-TiAl₃ [Coupled model of sintering powders of the system Ti-TiAl₃]. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta = Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*, 2009, vol. 314, no. 2, pp. 96–101.
- Sorokova S.N., Knyazeva A.G. Matematicheskoe modelirovanie ob"emnykh izmenenii v pro-tsesse spekaniya poroshkov sistemy Ti-Al [Mathematic simulation of bulk changes during sintering of Ti-Al powders]. *Fizicheskaya mezomekhanika = Physical Mesomechanics*, 2008, vol. 11, no. 6, pp. 95–101.
- Sorokova S.N., Knyazeva A.G. Simulation of coating phase structure formation in solid phase synthesis assisted by electron-beam treatment. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2008, vol. 42 (4), pp. 443–451.
- Shishkovsky I.V. Laser-controlled intermetallics synthesis during surface cladding. *Laser Surface Engineering*. Woodhead Publishing, 2015, ch. 11, pp. 237–286. DOI: 10.1016/B978-1-78242-074-3.00011-8.
- 20. Knyazeva A.G., Anisimova M.A. Two-level model of composite synthesis on a substrate from a powder mixture of TiO₂ and Al. 1. Model description and simple examples. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2023, vol. 14 (3), pp. 73–102.
- Mukasyan A.S., Shuck C.E. Kinetics of SHS reactions: A review. *International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*, 2017, vol. 26 (3), pp. 145–165. DOI: 10.3103/S1061386217030049.
- 22. Anisimova M.A., Knyazeva A.G. Otsenka napryazhenii i deformatsii v protsesse formirovaniya perekhodnogo sloya mezhdu chastitsei i matritsei [Evaluation of the stress and strain during transition layer formation between a particle and a matrix]. Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika = Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics, 2020, no. 63, pp. 60–71. DOI: 10.17223/19988621/63/6.
- 23. Knyazeva A., Kryukova O. Modeling of multiphase composite synthesis on substrate taking into account the staging of chemical reactions. *Applied Solid State Chemistry*, 2019, vol. 4 (1), pp. 9–24.
- 24. Knyazeva A.G., Kryukova O.N. Modeling Ti-Al-C-composite synthesis on a substrate under control of electron beam. *Journal of Crystal Growth*, 2020, vol. 531, p. 125349. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125349.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Князева Анна Георгиевна – родилась в 1962 году, д-р физ.-мат. наук, проф., главный научный сотрудник, лаборатория нелинейной механики метаматериалов и многоуровневых систем, Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН). Область научных интересов: моделирование, физико-химические превращения, модели деформируемых сред, неравновесная термодинамика, тепломассообмен, горение, технологические процессы. Опубликовано 410 научных работ. (Адрес: 634055, Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4. E-mail: anna-knyazeva@mail.ru).

Knyazeva Anna Georgievna (b. 1962) – Doctor of Sciences (Phys. & Math.), proffessor, lead researcher, Laboratory of Nonlinear Mechanics of Metamaterials and Multilevel Systems, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (ISPMS SB RAS). Her research interests are currently focused on modeling, physical-chemical conversion, models of deformable media, irreversible thermodynamics, heat and mass transfer, combustion, and technology processes. She is the author of 410 scientific papers. (Address: 2/4, Akademicheskii Av., Tomsk, 634055, Russia. E-mail: anna-knyazeva@mail.ru).



Анисимова Мария Александровна – родилась в 1988 году, канд. физ.мат. наук, младший научный сотрудник, лаборатория нелинейной механики метаматериалов и многоуровневых систем, Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН). Область научных интересов: математическое моделирование химических и тепловых процессов в композиционных материалах. Опубликована 31 научная работа. (Адрес: 634055, Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4. E-mail: anisimova mawa@mail.ru).

Anisimova Maria Alexandrovna (b. 1988) – Candidate of Sciences (Phys. & Math.), junior researcher, Laboratory of Nonlinear Mechanics of Metamaterials and Multilevel Systems, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of he Russian Academy of Sciences (ISPMS SB RAS). Her research interests are currently focused on mathematical modeling of chemical and thermal processes in composite materials. She is th author of 31 scientific papers. (Address: 2/4, Akademicheskii Av., Tomsk, 634055, Russia. E-mail: anisimova_mawa@mail.ru).

Чумаков Юрий Александрович – родился в 1984 году, канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, лаборатория нелинейной механики метаматериалов и многоуровневых систем, Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН). Область научных интересов: математическое моделирование, программирование. Опубликовано 100 научных работ. (Адрес: 634055, Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4. E-mail: chya@ispms.ru).

Chumakov Yury Alexandrovich (b. 1984) – Candidate of Sciences (Phys. & Math.), researcher, Laboratory of Nonlinear Mechanics of Metamaterials and Multilevel Systems, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (ISPMS SB RAS). His research interests are currently focused on mathematical modeling and programming. He is the author of 100 scientific papers. (Address: 2/4, Akademicheskii Av., Tomsk, 634055, Russia. E-mail: chya@ispms.ru).

> Статья поступила 21 августа 2023 г. Received August, 21, 2023

To Reference:

Knyazeva A.G., Anisimova M.A., Chumakov Yu.A. Modelirovanie upravlyaemogo sinteza intermetallidnogo kompozita s raznymi sposobami opisaniya kinetiki fazoobrazovaniya [Modeling of controlled synthesis of intermetallic composite with different describing phase formation kinetics methods]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 3 (60), pp. 32–45. DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-32-45.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль–сентябрь

№ 3 (60)

УДК 621.57

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ АБСОРБЦИОННЫХ ТЕПЛОВЫХ НАСОСОВ ПОВЫШАЮЩЕГО ТИПА ДЛЯ ТЕПЛОСНАБЖЕНИЯ НА ОСНОВЕ СРЕДНЕТЕМПЕРАТУРНЫХ ГЕОТЕРМАЛЬНЫХ ИСТОЧНИКОВ

С.В. Алексеенко², Д.Г. Мухин^{1,2}, К.И. Степанов², С.Л. Елистратов^{1,2}, Н.В. Миронова¹

¹Новосибирский государственный технический университет ²Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН

На территории Российской Федерации имеется большое количество геотермальных источников тепла с низким температурным потенциалом - не более 50 °C, на базе которых возможно создание экологически чистых систем теплоснабжения с использованием тепловых насосов. Выполнены оценки эффективности использования для этих целей абсорбционных тепловых насосов повышающего типа, в которых геотермальный или техногенный теплоисточник с температурой 40...45 °С теоретически способен обеспечить в зимний период нагрев теплоносителя системы теплоснабжения до 55...63 °С при удельных затратах электрической энергии на работу растворных, циркуляционных насосов, систем автоматизации и управления не более 1,0 % от их полезной теплопроизводительности. В качестве охлаждающей среды рассматривался окружающий воздух с отрицательными температурами, достаточными для понижения температуры охлаждающей жидкости до минус 4 °С. Диапазон полученных расчетных значений коэффициентов трансформации теплоты для рассмотренных условий составил α = 0,46...0,47. Проведен анализ сравнительных преимуществ и недостатков использования в качестве рабочих тел водных растворов солей LiBr и LiCl, на основании которого показана перспективность применения в абсорбционных тепловых насосах повышающего типа водных растворов соли LiCl.

Ключевые слова: геотермальный теплоисточник, отопление и горячее водоснабжение, абсорбционный тепловой насос повышающего типа, водные растворы бромида и хлорида лития.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-46-58

Введение

Для объектов промышленного и гражданского назначения в труднодоступных районах России с холодным климатом, прежде всего на территории Севера и Дальнего Востока, актуальной является задача организации надежного отопления и горячего водоснабжения (ГВС), в том числе с использованием местных возобновляемых энергоресурсов. При наличии высокотемпературных (более 90 °С) геотермальных источников тепла эту задачу можно решить путем создания систем прямого отопления. Однако большая часть используемых и разведанных геотермальных источников России [1, 2] имеет температуру воды на устье скважин не более 50 °С, что не позволяет обеспечить отопление и ГВС. Так, например, известные геотермальные источники в пос. Белый Яр Томской области [3] и в Тункинской долине Республики Бурятия [4] используются только для бальнеологии. Следует также отметить, что такой среднетемпературный уровень имеют

2023

Расчеты цикла повышающего АБТН выполнены в рамках государственного задания ИТ СО РАН АААА-А17-121031800229-1.

пластовые воды нефтедобывающих скважин. Необходимо иметь в виду, что температура горячей воды для ее полного обеззараживания в системах ГВС закрытого типа [5] должна быть более 50 °C.

Для преобразования теплоты низкого (до 40 °C) в высокотемпературное тепло (свыше 50 °C) для нужд отопления и ГВС в мире широко применяют тепловые насосы парокомпрессионного типа (ПКТН), использующие для своей работы электроэнергию, что не всегда является технически возможным и экономически выгодным. Так, например, при утилизации теплоты артезианской воды с температурой 7...10 °C для выработки 1,0 МВт тепла с температурой 60°C потребуется затратить около 0,3 МВт электроэнергии. При наличии источников тепла с температурой свыше 20 °C технически возможно использование абсорбционных бромисто-литиевых тепловых насосов (АБТН), для реализации рабочих циклов которых используют не электрическую, а тепловую энергию высокого температурного потенциала (продукты сжигания природного газа, водяной пар с давлением более 4 атм. и т. п.) и незначительное количество электроэнергии для работы растворных насосов и приборов автоматики. Согласно многочисленным данным зарубежных и российских производителей эти затраты не превышает 3...4 кВт электроэнергии на каждые 1000 кВт выработанной тепловой энергии.

По температурному потенциалу теплоты, используемой для реализации рабочих циклов, АБТН подразделяются на повышающий и понижающий типы (далее «повышающий АБТН» и «понижающий АБТН»). В понижающем АБТН используется внешний источник энергии высокого температурного потенциала, а полезным продуктом является тепло более низкого температурного потенциала. Согласно принятой классификации [6] повышающие АБТН относятся к теплотехническим устройствам расщепляющего типа, в которых производится трансформация входящего в них потока тепловой энергии среднего температурного уровня (~40...50 °C) соответственно на более высокий и более низкий температурные уровни. Таким образом, в повышающем АБТН большее количество среднепотенциальной теплоты греющего геотермального источника можно преобразовать в меньшее количество высокопотенциальной теплоты для нужд отопления и ГВС.

Принципиальным преимуществом повышающих АБТН в системах геотермального теплоснабжения является то, что они не используют для своей работы традиционные высокопотенциальные источники тепловой энергии (водяной пар, природный газ, высокотемпературные отходящие дымовые газы и т. п.). Достаточным является наличие только источника теплоты среднего температурного уровня (термальная, пластовая вода и т. п.) и низкопотенциального источника охлаждающей среды. В качестве последнего может рассматриваться окружающий воздух отрицательных температур.

Таким образом, эффективность практического применения повышающих АБТН в системах отопления и ГВС определяется возможностью прямой утилизации с их помощью теплоты наиболее распространенных в России геотермальных источников среднего температурного потенциала, а также сравнительной простотой конструкции и эксплуатационной надежностью.

1. Схема и принцип работы повышающего АБТН с одноступенчатыми абсорбцией и десорбцией

Принцип работы повышающего АБТН с одноступенчатыми процессами абсорбции и десорбции (рис. 1) основан на способности водного раствора соли LiBr (абсорбента) поглощать (абсорбировать) пар хладагента (воды), имеющего в равновесном состоянии более низкую температуру, чем сам раствор [6]. Это позволяет производить передачу определенной части тепла от источника теплоты среднего температурного потенциала на более высокий температурный уровень для обеспечения работы систем отопления и ГВС в отопительном периоде, а также в некоторых предельных случаях для нагрева жидкостей до 120 °С и генерации пара низкого давления в промышленности [7].



Рис. 1 – Принципиальная схема повышающего АБТН с одноступенчатыми абсорбцией и десорбцией:

1 – испаритель; 2 – абсорбер; 3 – генератор (десорбер); 4 – конденсатор; 5 – растворный теплообменник; 6 – циркуляционный насос хладагента (воды); 7 – насос слабого раствора; 8 – насос крепкого раствора

Fig. 1 – A principal scheme of a boost LBAHP with single-stage absorption and desorption:

1 – is an evaporator; 2 – is an absorber; 3 – is a generator (desorber); 4 – is a condenser; 5 – is a solution heat exchanger; 6 – is a circulation pump of a refrigerant (water); 7 – is a weak solution pump; 8 – is a strong solution pump

Утилизация теплоты среднего температурного потенциала производится в испарителе *1* и генераторе *3*. Полезным выходным продуктом в повышающем АБТН является теплоноситель, нагретый в абсорбере *2*. Для работы генератора *3* необходим подвод охлаждающей жидкости в конденсатор *4*, где происходит конденсация паров хладагента. Для повышения энергетический эффективности используется рекуперативный растворный теплообменник *5*, предназначенный для одновременного охлаждения слабого раствора перед его подачей в генератор *3* и нагрева крепкого раствора перед его подачей в абсорбер *2*. Для осуществления непрерывной циркуляции раствора и хладагента используются герметичные насосы хладагента и раствора *6*–8.

В межтрубном пространстве АБТН поддерживается разрежение (вакуум), что исключает попадание хладагента и абсорбента в охлаждаемую и нагреваемую жидкости. Для поддержки необходимого уровня разрежения в АБТН используется специальная система газоотделения (на рис. 1 не показана). В повышающем АБТН в отличие от стандартного понижающего АБТН рекуперативный растворный теплообменник работает по обратной схеме: крепкий раствор после генератора нагревается, а слабый раствор после абсорбера охлаждается.

2. Исходные данные и методика расчета цикла повышающего АБТН

Исходные данные для расчета параметров цикла повышающего АБТН при использовании теплоты геотермального источника приведены в табл. 1.

Таблица 1 / Table 1

Исходные данные для расчета цикла повышающего АБТН Initial data for calculating the cycle of boost LBAHP

Параметр	Значение	
Температура геотермальной воды на входе в испаритель и генератор $t_{s1}, t_{h1}, °C$	4045	
Температура геотермальной воды на выходе из испарителя и генератора t_{s2} , t_{h2} , °C	3540	
Температура конденсации хладагента в конденсаторе $t_{\rm K}$ °C	4	
Недорекуперация теплоты хладагента на холодном конце испарителя (разница температур между геотермальной водой на выходе из испарителя t_{32} и испаряемым хладагентом t_0), °С	3	
Недорекуперация теплоты крепкого раствора на горячем конце генератора (разница температур между геотермальной водой на выходе из генератора t_{h2} и крепким раствором на выходе из генератора t_4), °C	3	
Недорекуперация теплоты хладагента на горячем конце конденсатора (разница температур между охлаждающей жидкостью на выходе из конденсатора t_{k2} и конденсируемым хладагентом t_{k}), °С	3	

Для оценки энергетической эффективности рабочего цикла повышающего АБТН определяют значения коэффициента трансформации теплоты [8]:

$$\alpha = \frac{q_a}{q_0 + q_h},\tag{1}$$

где q_a , q_0 и q_h – соответственно удельные тепловые потоки в абсорбере, испарителе и генераторе, кДж/кг.

На практике количественные значения α будут определяться совершенством теплообменного оборудования и параметрами внешних теплоносителей.

На рис. 2 приведена расчетная схема повышающего АБТН с одноступенчатыми абсорбцией и десорбцией, на которой обозначены характерные точки, определяющие начало и завершение рабочих процессов.

Для рабочего цикла повышающего АБТН (см. рис. 1, 2 и 3) характерны следующие процессы:

– пленочное испарение хладагента (воды) при постоянной температуре t_0 и давлении p_0 в испарителе (процесс 1-1');

 – нагрев хладагента (воды) при движении из конденсатора в межтрубное пространство испарителя (процесс 3-1);

– конденсация перегретого водяного пара, выходящего из упариваемого раствора, при постоянной температуре $t_{\rm K}$ и давлении $p_{\rm K}$ (процесс 3'-3);

– нагрев концентрированного (крепкого) раствора LiBr в рекуперативном растворном теплообменнике (процесс 4-8);

 подогрев концентрированного раствора LiBr и абсорбция водяных паров с разбавлением крепкого раствора до концентрации слабого раствора (процесс 8-2);

 – охлаждение слабого раствора LiBr в рекуперативном растворном теплообменнике (процесс 2-7);

– десорбция слабого раствора LiBr в генераторе с повышением его концентрации до уровня крепкого раствора (процесс 7-4).



Рис. 2 – Характерные точки рабочего цикла повышающего АБТН с одноступенчатыми абсорбцией и десорбцией

Fig. 2 – Characteristic points of the duty cycle of boost LBAHP with single-stage absorption and desorption

Расчет рабочего цикла был выполнен согласно приведенной в работе [6] методики с учетом опыта экспериментальных исследований [9] и эксплуатации реальных промышленных образцов АБТН.

Основные расчетные соотношения следующие:

- кратность циркуляции раствора

$$a = \frac{\xi_r}{\Delta \xi},\tag{2}$$

где ξ_r и $\Delta \xi$ – соответственно концентрация крепкого раствора и разность концентраций крепкого и слабого растворов (зона дегазации), %;

- удельный тепловой поток в генераторе (десорбере), кДж/кг,

$$q_h = i_{3'} - i_4 + a(i_4 - i_7); \tag{3}$$

- удельный тепловой поток в испарителе, кДж/кг,

$$q_0 = i_{1'} - i_3; \tag{4}$$

– удельный тепловой поток в конденсаторе, кДж/кг,

$$q_k = i_{3'} - i_3; \tag{5}$$

- удельный тепловой поток в абсорбере, кДж/кг,

$$q_a = i_{1'} - i_8 + a(i_8 - i_2); \tag{6}$$

- удельный тепловой поток в рекуперативном теплообменнике, кДж/кг,

$$q_t = a(i_2 - i_7) = (a - 1)(i_8 - i_4), \tag{7}$$

где i_i – энтальпии хладагента и раствора в соответствующих рабочих точках цикла (см. рис. 2, 3), кДж/кг;

уравнение теплового баланса повышающего АБТН

$$q_0 + q_n = q_a + q_k. \tag{8}$$

В процессе расчетов были определены температура и давление абсорбента и хладагента в характерных точках, оптимальная концентрация крепкого и слабого растворов, произведена оценка значений коэффициента трансформации теплоты, определены теоретические значения температур нагретой жидкости на выходе из абсорбера.

Принципиальное отличие цикла повышающего АБТН от стандартного цикла понижающего АБТН заключается в том, что крепкий раствор LiBr поступает в абсорбер недогретым относительно равновесной температуры начала абсорбции С одной стороны, это улучшает процесс абсорбции, так как он начинается сразу после входа крепкого раствора в абсорбер. Но с другой, из-за разбавления крепкий раствор не достигает равновесной температуры начала абсорбции и попадает на трубчатку абсорбера с существенно меньшей температурой (на рис. 3 это температура в зоне правого края заштрихованной области). Данное обстоятельство важно именно для повышающего АБТН, так как от температуры крепкого раствора на входе в абсорбер зависит температура, до которой возможен нагрев теплоносителя системы теплоснабжения.

3. Результаты расчетов

На рис. 3 представлен в графическом виде один из результатов расчета на диаграмме Дюринга [10].



Рис. 3 – Теоретический цикл повышающего АБТН с одноступенчатыми абсорбцией и десорбцией для исходной температуры геотермального источника 40 °C *Fig. 3* – A theoretical cycle of a boost absorption heat pump with single-stage absorption and desorption for the initial temperature of the geothermal source of 40 °C

На рис. 4 приведена зависимость расчетных значений коэффициента трансформации повышающего АБТН в зависимости от температуры геотермального источника и параметров цикла.



Рис. 4 – Расчетная зависимость коэффициента трансформации α повышающего АБТН от температуры воды на входе в испаритель и генератор t_{s1} , t_{h1} при температуре конденсации хладагента в конденсаторе $t_{\kappa} = 4$ °C

Fig. 4 – The calculated dependence of the transformation ratio α of the boost LBAHP on the water temperature at the inlet to the evaporator and generator t_{s1} , t_{h1} at the temperature of the refrigerant condensation in the condenser $t_c = 4$ °C

В табл. 2 представлены практически важные для разработки повышающих АБТН параметры.

Таблица 2 / Table 2

Температуры внешних теплоносителей для обеспечения работы повышающего АБТН

Th	e temperature of	external hea	t carriers t	to ensure the	operation of	the boo	st LBAHP
----	------------------	--------------	--------------	---------------	--------------	---------	----------

	Температура геотермальной воды		
Порометр	на входе в АБТН (испаритель и генератор)		
Параметр	$t_{s1}, t_{h1}, ^{\circ}\mathrm{C}$		
	40	45	
Температура геотермальной воды на выходе			
из испарителя и генератора, t_{s2} , t_{h2} , °C	35	40	
Температура охлаждающей жидкости (ан-			
тифриза) на входе в конденсатор t_{k1} , °С	-4	-4	
Температура охлаждающей жидкости (ан-			
тифриза) на выходе из конденсатора t_{k2} , °C	1	1	
Температура нагреваемой среды на входе			
в абсорбер t_{w1} , °С	до 50	до 58	
Температура нагретой среды на выходе	до 55 (уточняется	до 63 (уточняется	
из абсорбера <i>t</i> _{w2} , °C	экспериментально)	экспериментально)	

Необходимо отметить, что ранее в работе [8] были построены общие расчетные диаграммы эффективности повышающего АБТН в зависимости от параметров внешних теплоносителей, однако в этой работе не ставилась задача по оценке достижимой температуры нагретой жидкости и значение температуры нагрева жидкости 50 °C в работе было принято заведомо ниже необходимого для теплоснабжения и ГВС уровня.

4. Оценка возможности использования водного раствора LiCl в абсорбционном тепловом насосе повышающего типа

В качестве абсорбента в повышающих абсорбционных тепловых насосах может быть использован водный раствор соли LiCl. Этот абсорбент по сравнению с раствором LiBr обладает меньшей коррозионной активностью и существенно дешевле в производстве. Однако LiCl обладает существенно меньшей растворимостью по сравнению с LiBr, что приводит к ограниченному применению LiCl для выработки холода. Например, при получении для систем кондиционирования холодной воды с температурой 5...7 °C с отводом теплоты абсорбции с температурой 26...29 °C в градирни оросительного типа уровень концентраций водного раствора LiCl приближается к опасной зоне кристаллизации.

Однако в тепловых насосах температурные уровни охлажденной и охлаждающей (нагреваемой) жидкостей существенно выше по сравнению с холодильными машинами, что уже принципиально не ограничивает применение в качестве абсорбента водных растворов соли LiCl. В работах [11, 12] утверждается, что эффективность рабочего цикла с абсорбентом на основе LiCl даже несколько выше, чем для LiBr. Учитывая вышеизложенное, практический интерес для утилизации геотермального тепла представляют простые оценки сравнительной энергетической эффективности рабочих циклов тепловых насосов с использованием в качестве рабочих тел водных растворов LiCl и LiBr.

На рис. 5 приведен теоретический цикл повышающего теплового насоса в диаграмме Дюринга для раствора LiCl, на основе данных работы [14]. При его построении были учтены ключевые параметры цикла для водного раствора LiBr: температуры геотермальной воды на входе в испаритель и генератор, в конденсаторе, испарителе, слабого раствора на выходе из абсорбера и крепкого – на выходе из генератора (десорбера).



Рис. 5 – Теоретический цикл повышающего абсорбционного теплового насоса с одноступенчатыми абсорбцией и десорбцией в диаграмме Дюринга для водного раствора LiCl при температуре геотермальной воды на входе 40 °C

Fig. 5 – A theoretical cycle of a boost absorption heat pump with single-stage absorption and desorption in the Dühring diagram for an LiCl aqueous solution at an inlet temperature of geothermal water of 40 °C При одинаковых на рис. 3 и 5 площадях заштрихованных областей, величина которых отражает энергетическую эффективность циклов, можно видеть, что цикл с LiCl выгодно отличается от LiBr более широкой зоной дегазации: соответственно 3,4 и 2,7 % при концентрациях крепких растворов 41 и 53,7 %. Согласно (2) это позволяет значительно уменьшить кратность циркуляции.

С другой стороны, для практического применения важной характеристикой является также абсорбирующая способность рабочих растворов, которая зависит от величины растворимости соли в воде. Экспериментальные исследования авторов [13] показали, что интенсивность абсорбции у водных растворов LiBr выше, чем у LiCl. Следствием этого может стать относительное увеличение поверхности теплообмена абсорбера, что отразится на технико-экономических показателях тепловых машин, работающих на водных растворах чистой соли LiCl. Однако этот недостаток может быть устранен благодаря использованию многокомпонентных растворов на основе H2O-LiCl, где в качестве добавок используются хлориды и нитраты щелочных, щелочно-земельных металлов и цинка [15]. Эти многокомпонентные системы представляются более перспективными, чем смеси солей на основе H2O-LiBr из-за меньшей дефицитности хлоридов и нитратов, более низкой их стоимости, меньшей коррозионной активности и большей термической устойчивости. Данные о более высокой растворимости в области высоких температур многокомпонентных водных растворов на основе LiCl, таких как LiCl-CsCl и LiCl-LiNO3 [15], дают основания рассчитывать на хорошие перспективы применения этой соли в повышающих абсорбционных тепловых насосах для эффективной утилизации теплоты геотермальных источников для нужд децентрализованного отопления и ГВС в регионах с холодным климатом.

Заключение

Результаты расчетов ,по определению эффективности теоретических циклов повышающих АБТН свидетельствуют о принципиальной возможности эффективного использования теплоты геотермальных источников с температурой 40...45 °C для нагрева теплоносителя систем отопления и ГВС, по крайней мере, до 55...63 °C. При этом для нагрева может быть использовано менее половины исходного потенциала теплоты геотермального источника ($\alpha = 0,46...0,47$) при максимально возможном значении $\alpha = 0,5$ для этого типа тепловых насосов [6].

Принципиально важным является то, что в отличие от ПКТН и понижающих АБТН в повышающих АБТН процесс нагрева теплоносителя системы теплоснабжения осуществляется непосредственно за счет части тепловой энергии самого геотермального источника с небольшими затратами электроэнергии для работы растворных насосов и системы автоматики (6...8 кВт на каждый 1,0 МВт полезно выработанного тепла для нужд теплоснабжения).

При определенных условиях в качестве абсорбента в повышающем абсорбционном тепловом насосе могут быть использованы водные растворы соли LiCl. Однако по причине сравнительно меньшей, чем у чистой соли LiBr растворимости в воде, при одинаковых показателях энергоэффективности их теоретических циклов для этого потребуется дополнительное увеличение поверхности теплообмена абсорбера.

Одним из главных препятствий при теоретическом определении сравнительной энергоэффективности перспективных абсорбционных тепловых насосов повышающего типа является недостаточная точность теоретических расчетов свойств одно- и многокомпонентных растворов в области высоких температур и концентраций [15]. Это делает актуальным проведение комплексных экспериментальных исследований на пилотных установках геотермальной энергетики с фиксированными поверхностями теплообмена рабочих аппаратов.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Геотермическая карта России. URL: https://www.geokniga.org/maps/1009 (дата обращения: 08.09.2023).
- Геотермальные ресурсы России. URL: https://geographyofrussia.com/geotermalnyeresursy-rossii/ (дата обращения: 08.09.2023).
- Горячий источник пос. Белый Яр. URL: http://blog.kob.tomsk.ru/wiki/ index.php?title=Горячий источник пос. Белый Яр (дата обращения: 08.09.2023).
- Целебные источники. URL: https://fanatbaikala.ru/portfolio-view/mineralnye-istochniki (дата обращения: 08.09.2023).
- Постановление Госстроя РФ от 27 сентября 2003 г. № 170 «Об утверждении Правил и норм технической эксплуатации жилищного фонда». – URL: https://base.garant.ru/ 12132859/ (дата обращения: 08.09.2023).
- Абсорбционные преобразователи теплоты: монография / А.В. Бараненко, Л.С. Тимофеевский, А.В. Долотов, А.В. Попов. – СПб.: СПбГУНиПТ, 2005. – 338 с.
- Cudok F., Giannetti N. Absorption heat transformer state-of-the-art of industrial applications // Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2021. – Vol. 141. – P. 110757. – DOI: 10.1016/j.rser.2021.110757.
- 8. Дзино А.А., Малинина О.С. Оценка влияния температуры греющего источника на энергетическую эффективность одноступенчатых циклов абсорбционных термотрансформаторов // Омский научный вестник. Серия: Авиационно-ракетное и энергетическое машиностроение. – 2019. – Т. 3, № 3. – С. 33–39. – DOI: 10.25206/2588-0373-2019-3-3-33-39.
- Experimental study of negative temperatures in lithium-bromide absorption refrigerating machines / K.I. Stepanov, D.G. Mukhin, S.V. Alekseenko, O.V. Volkova // Thermophysics and Aeromechanics. – 2015. – Vol. 22 (4). – P. 481–489. – DOI: 10.1134/S0869864315040095.
- 10. ASHRAE Handbook of Fundamentals. Atlanta, 1997.
- 11. Thermodynamic evaluation of LiCl-H2O and LiBr-H2O absorption refrigeration systems based on a novel model and algorithm / J. Ren, Z. Qian, Z. Yao, N. Gan, Y. Zhang // Energies. 2019. Vol. 12. P. 3037. DOI: 10.3390/en12153037.
- Energy analysis of lithium bromide-water and lithium chloride-water based single effect vapour absorption refrigeration system: A comparison study/ T. Ahmad, Md. Azhar, M.K. Sinha, Md. Meraj, I.M. Mahbubul, A. Ahmade // Cleaner Engineering and Technology. - 2022. - Vol. 7. - P. 100432. - DOI: 10.1016/j.clet.2022.100432.
- Kim K.J., Ameel T.A., Wood B.D. Performance evaluations of LiCl and LiBr for absorber design applications in the open-cycle absorption refrigeration system // Journal of Solar Energy Engineering. – 1997. – Vol. 119 (2). – P. 165–173. – DOI: 10.1115/1.2887898.
- Conde-Petit M.R. Aqueous solutions of lithium and calcium chlorides: Property formulations for use in air conditioning equipment design. – Zurich, Switzerland: M. Conde Engineering, 2014. – 29 p. – URL: http://www.mrc-eng.com/Downloads/Aqueous%20LiCl &CaCl2%20Solution%20Props.pdf (accessed: 08.09.2023).
- Водные растворы абсорбционных термотрансформаторов: монография / А.В. Бараненко, С.В. Караван, О.А. Пинчук, Д.В. Караван. СПб.: Страта, 2019. 414 с. (Основы энергосбережения).

EVALUATION OF THE EFFICIENCY OF THE USE OF BOOSTER-TYPE ABSORPTION HEAT PUMPS FOR HEAT SUPPLY BASED ON MEDIUM-TEMPERATURE GEOTHERMAL SOURCES

Alekseenko S.V.², Mukhin D.G.^{1,2}, Stepanov K.I.², Elistratov S.L.^{1,2}, Mironova N.V.¹ ¹Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

²S.S. Kutateladze Institute of Thermal Physics SB RAS, Novosibirsk, Russia

On the territory of the Russian Federation, there are a large number of geothermal heat sources with a low, no more than 50 °C, temperature potential, on the basis of which it is possible to create environmentally friendly heat supply systems using heat pumps. Efficiency assessments

were made for the use of boost-type absorption heat pumps for these purposes, in which a geothermal or technogenic heat source with a temperature of 40...45 °C is theoretically capable of providing heating of the heat carrier of the heat supply system to 55...63 °C in winter at specific costs of electrical energy for the operation of circulation pumps, automation and control systems not more than 1.0 % of their useful heat output. The ambient air with negative temperatures sufficient to lower the temperature of the coolant to minus 4°C was considered as a cooling medium. The range of calculated values of the heat transformation coefficients for the considered conditions was $\alpha = 0.46...0.47$. An analysis of the comparative advantages and disadvantages of using aqueous solutions of LiBr and LiCl salts as working bodies was carried out, on the basis of which the prospects for using the LiCl salt aqueous solutions in absorption heat pumps of a boosting type were shown.

Keywords: geothermal heat source, heating and hot water supply, boost-type absorption heat pump, aqueous solutions of lithium bromide and chloride

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-46-58

REFERENCES

- 1. Geothermal map of Russia. (In Russian). Available at: https://www.geokniga.org/maps/1009 (accessed 08.09.2023).
- Geothermal resources of Russia. (In Russian). Available at: https://geographyofrussia.com/ geotermalnye-resursy-rossii/ (accessed 08.09.2023).
- Goryachii istochnik pos. Belyi Yar [Hot spring of the village Bely Yar]. Available at: http://blog.kob.tomsk.ru/wiki/index.php?title=Горячий_источник_пос._Белый_Яр (accessed 08.09.2023).
- 4. *Tselebnye istochniki* [Healing springs]. Available at: https://fanatbaikala.ru/portfolioview/mineralnye-istochniki (accessed 08.09.2023).
- Decree of the Gosstroy of the Russian Federation of September 27, 2003 No. 170 "On approval of the Rules and norms for the technical operation of the housing stock". (In Russian). Available at: https://base.garant.ru/12132859/ (accessed 08.09.2023).
- Baranenko A.V., Timofeevskii L.S., Dolotov A.V., Popov A.V. *Absorbtsionnye preobrazovateli teploty* [Absorption heat converters]. St. Petersburg, SPbGUNiPT Publ., 2005. 338 p.
- Cudok F., Giannetti N. Absorption heat transformer state-of-the-art of industrial applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021, vol. 141, p. 110757. DOI: 10.1016/j.rser.2021.110757.
- Dzino A.A., Malinina O.S. Otsenka vliyaniya temperatury greyushchego istochnika na energe-ticheskuyu effektivnost' odnostupenchatykh tsiklov absorbtsionnykh termotransformatorov [Estimation of the influence of heating source temperature on energy efficiency of singlestage absorption thermal transformer cycles]. *Omskii nauchnyi vestnik. Seriya: Aviatsionnoraketnoe i energeticheskoe mashinostroenie = Omsk Scientific Bulletin. Series Aviation Rocket and Power Engineering*, 2019, vol. 3, no. 3, pp. 33–39. DOI: 10.25206/2588-0373-2019-3-3-33-39.
- Stepanov K.I., Mukhin D.G., Alekseenko S.V., Volkova O.V. Experimental study of negative temperatures in lithium-bromide absorption refrigerating machines. *Thermophysics and Aeromechanics*, 2015, vol. 22, no. 4, pp. 481–489. DOI: 10.1134/S0869864315040095.
- 10. ASHRAE Handbook of Fundamentals. Atlanta, 1997.
- Ren J., Qian Z., Yao Z., Gan N., Zhang Y. Thermodynamic evaluation of LiCl-H2O and LiBr-H2O absorption refrigeration systems based on a novel model and algorithm. *Energies*, 2019, vol. 12, p. 3037. DOI: 10.3390/en12153037.
- Ahmad T., Azhar M., Sinha M.K., Meraj M., Mahbubul I.M., Ahmade A. Energy analysis of lithium bromide-water and lithium chloride-water based single effect vapor absorption refrigeration system: A comparison study. *Cleaner Engineering and Technology*, 2022, vol. 7, p. 100432. DOI: 10.1016/j.cell.2022.100432.
- Kim K.J., Ameel T.A., Wood B.D. Performance evaluations of LiCl and LiBr for absorber design applications in the open-cycle absorption refrigeration system. *Journal of Solar Energy Engineering*, 1997, vol. 119 (2), pp. 165–173. DOI: 10.1115/1.2887898.

- Conde-Petit M.R. Aqueous solutions of lithium and calcium chlorides: Property formulations for use in air conditioning equipment design. Zurich, Switzerland, M. Conde Engineering, 2014. 29 p. Available at: http://www.mrc-eng.com/Downloads/Aqueous%20LiCl&CaCl2% 20Solution%20Props.pdf (accessed 08.09.2023).
- Baranenko A.V., Karavan S.V., Pinchuk O.A., Karavan D.V. Vodnye rastvory absorbtsionnykh termotransformatorov [Aqueous solutions of absorption thermotransformers]. St. Petersburg, Strata Publ., 2019. 414 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Алексеенко Сергей Владимирович – родился в 1950 году, д-р физ.мат. наук, профессор, академик РАН, научный руководитель, Институт теплофизики СО РАН. Область научных интересов: волновые явления и процессы переноса в двухфазных средах, жидкие пленки и ривулеты, вихревые и когерентные структуры, турбулентные струи, экспериментальные методы, моделирование аэродинамики в топочных камерах, термическая переработка отходов, энергосберегающие технологии. Опубликовано 400 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 1. E-mail: asvasus@yandex.ru).

Alekseenko Sergey Vladimirovich (b. 1950) – Doctor of Sciences (Phys. & Math.) of science, professor, academician, scientific head, Institute of Thermophysics. His research interests are currently focused on Wave phenomena and transfer processes in two-phase media, Liquid films and rivulets, Vortical and coherent structures, Turbulent jets, Experimental methods, Modeling of aerodynamics in furnaces, Thermal waste treatment, Energy saving technologies. He is author of 400 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Av., Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: asvasus@yandex.ru).



Мухин Дмитрий Геннадьевич – родился в 1979 году, аспирант, кафедра ТЭС, НГТУ. Область научных интересов: абсорбционные тепловые насосы и холодильные машины, энергосбережение, вакуумные выпарные установки, аппараты мгновенного вскипания. Опубликовано 22 научные работы. (Адрес: Россия, 630073, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: mukhindg@mail.ru).

Mukhin Dmitry Gennadievich (b. in 1979) – post-graduate student, Department of «Thermal Power Stations», NSTU, NSTU. Research interests: absorption heat pumps and chillers, energy saving, vacuum evaporators, flashing devices. Published 22 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: mukhindg@mail.ru).



Степанов Константин Ильич – родился в 1986 году, канд. техн. наук, главный инженер, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки, Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук (ИТ СО РАН). Область научных интересов: абсорбционные холодильные машины и тепловые насосы, энергосбережение, вакуумные выпарные установки, аппараты мгновенного вскипания, теплообменное оборудование, тепломассоперенос. Опубликовано 19 научных работ. (Адрес: 630090, г. Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 1. Е-mail: stepanov ki@mail.ru).

Stepanov Konstantin Ilyich (b. in 1986) – Candidate of Sciences (Eng.), Chief Engineer, Kutateladze Institute of Thermophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (IT SB RAS). Research interests: absorption refrigeration machines and heat pumps, energy saving, vacuum evaporators, flashers, heat exchange equipment, heat and mass transfer. Published 19 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Av., Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: stepanov_ki@mail.ru).



Елистратов Сергей Львович – родился в 1954 году, д-р техн. наук, доцент, профессор, кафедра ТЭС, НГТУ. Область научных интересов: теплоэнергетика, тепловые насосы, энергосбережение, термодинамика, тепломассообмен. Опубликовано 153 научные работы. (Адрес: Россия, 630073, г. Новосибирск, пр-т Карла Маркса, 20. Е-mail: elistratov.sl@yandex.ru).

Elistratov Sergey Lvovich (b. in 1954), Doctor of Sciences (Eng.), Associate Professor, Professor, Department of «Thermal Power Stations», NSTU. Research interests: thermal power engineering, heat pumps, energy saving, thermodynamics, heat and mass transfer. Published 153 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. Email: elistratov.sl@yandex.ru).



Миронова Нина Владимировна – старший преподаватель кафедры тепловых электрических станций Новосибирского государственного технического университета. Область научных интересов: теплоэнергетика, тепловые насосы, энергосбережение, термодинамика, тепломассообмен. Опубликовано 36 научных работ. (Адрес: Россия, 630073, г. Новосибирск, пр-т Карла Маркса, 20. E-mail: mironova.2013@corp.nstu.ru).

Mironova Nina Vladimirovna – Senior lector at the Department of Thermal Power Stations in the Novosibirs State Technical University. Her research interests include thermal power engineering, heat pumps, energy saving, thermodynamics, heat and mass transfer. Published 36 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: mironova.2013@corp.nstu.ru).

> Статья поступила 30 июля 2023 г. Received July 30, 2023

To Reference:

Alekseenko S.V., Mukhin D.G., Stepanov K.I., Elistratov S.L., Mironova N.V. Otsenka effektivnosti primeneniya absorbtsionnykh teplovykh nasosov povyshayushchego tipa dlya teplosnabzheniya na osnove srednetemperaturnykh geotermal'nykh istochnikov [Evaluation of the efficiency of the use of booster-type absorption heat pumps for heat supply based on mediumtemperature geothermal sources]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii* = *Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 3 (60), pp. 46–58. DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-46-58.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль–сентябрь

№ 3 (60)

_____ ΤΕ**λ**

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 535.8

2023

ОПТИЧЕСКАЯ ГИЛЬБЕРТ-ТОМОГРАФИЯ ГАЗОВЫХ СТРУЙ

В.А. Арбузов¹, Э.В. Арбузов^{1,2}, Ю.Н. Дубнищев¹, О.С. Золотухина¹, В.В. Лукашов¹

¹Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН ²Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН

Методы гильберт-оптики и преобразования сигналов служат основой для современных информационных и измерительных технологий. Физически преобразование Гильберта в частотном пространстве сводится к определенному виду фазовой трансформации фурьеспектра сигнала в широкой полосе частот. В работе на примере исследования изотермического течения струи фреона-22 обсуждается возможность реализации гильберт-томографии. Разработана оптическая система на базе широкоапертурного модернизированного теневого прибора ИАБ-463М, позволяющая выполнять четырехракурсную диагностику исследуемого фазового объекта с использованием зондирующих световых пучков, ориентированных под углами 0, $\pi/2$, $\pi/4$ и $3\pi/4$ к оптической оси теневого прибора, и одновременно регистрировать на отдельных участках ПЗС-матрицы скоростной камеры все четыре томографические проекции в виде гильберт-изображений. Для нахождения параметров исследуемой среды по данным гильберт-томографии в дальнейшем предлагается использование итерационной схемы Гершберга-Папулиса. Этот алгоритм реконструкции функции по ее данным Радона, полученным при ограниченном числе проекций, заключается в итерационных переходах от оценки функции в фурье-плоскости к ее оценке в пространственной области с корректировкой на основании априорной информации. В результате итерационного процесса спектр восстанавливаемой функции определяется на всей частотной плоскости, что позволяет определить значения искомой функции.

Ключевые слова: оптическая томография, метод Гершберга–Папулиса, преобразование Гильберта, невозмущающая диагностика, изотермическое течение, газовая струя.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-59-66

Введение

Методы оптической томографии нашли широкое применение в диагностике газо- и гидродинамических потоков, плазмы, явлений тепло- и массообмена и т. д. [1–4]. Для получения проекционных данных в оптической томографии обычно используются классические способы регистрации волнового фронта [5, 6].

В работах [7, 8] представлены результаты исследований газовых и реагирующих сред (пламен) методами гильберт-оптики в приближении осевой симметрии объекта визуализации. Гильберт-преобразование – это интегральная операция, выполняющая перераспределение энергии оптического сигнала в заданной полосе пространственных частот зондирующего поля [9]. При этом минимизируются энергетические потери сигнала. Методы гильберт-оптики позволяют визуализировать поля оптической фазовой плотности исследуемой среды в пространстве, заданном структурой зондирующего поля и оценивать, при соответствующей обработке, температурные поля и молярные концентрации продуктов горения.

Целью настоящей работы является развитие оптических томографических технологий в сочетании с гильберт-фильтрацией сигналов на диагностику полей фазовой оптической плотности газовых и реагирующих сред.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИТ СО РАН № 121031800217-8, ИМ СО РАН № FWNF-2022-0009.

^{© 2023} Арбузов В.А., Арбузов Э.В., Дубнищев Ю.Н., Золотухина О.С., Лукашов В.В.

1. Томографический комплекс

На базе теневого прибора [10] ИАБ-463М разработан комплекс, позволяющий выполнять четырехракурсное зондирование исследуемой среды с одновременной регистрацией томографических проекций гильберт-визуализированных фазовых структур (рис. 1).



Рис. 1 – Упрощенная оптическая схема гильберт-томографа, выполняющего четырехракурсное зондирование исследуемого фазового объекта

Fig. 1 – A simplified optical setup of the Hilbert tomograph performing four-angle probing of the studied phase object

Комплекс содержит осветительный модуль, состоящий из источника излучения l, объектива 2 и щелевой диафрагмы 3, помещенной в передней фурьеплоскости объектива 4. В качестве источника излучения используется лазер КLM-532-2000 с подавлением пространственной когерентности. Структура зондирующих световых полей, реализующих 4D томографическую диагностику, образована попарной конфигурацией зеркал 5 и 5', 6 и 6', 7 и 7', габаритные размеры которых $100 \times 15 \times 145$ мм, формирующих пучки, ориентированные относительно оптической оси теневого прибора под углами $\psi_q = \pi(q-1)/4$, где номер проекции q = 1, ..., 4. Фурье-спектр фазовых возмущений, индуцируемых в зондирующих полях объектом исследования, локализуется в частотной плоскости объектива 8, где помещен гильберт-фильтр 9. Объектив 10 преобразует фильтрованное поле в зависимости от спектральных характеристик светового источника в аналитический или гильберт-сопряженный оптический сигнал [7], который регистрируется ПЗС-матрицей скоростной видеокамеры 11.

Выбор технического решения томографа обусловлен возможностью использования большого поля зрения (400 мм) теневого прибора ИАБ-463М для организации четырехракурсной гильберт-диагностики исследуемой среды (рис. 2).





Fig. 2 – A sounding scheme and Radon data (phase structure) for four projections

Направление оси $\vec{z}_q q$ -й проекции совпадает с направлением зондирующего светового пучка. По оси \vec{x}_q задаются аргументы проекций Радона [11]. Исследуемое сечение расположено по нормали к общей для всех проекций оси \vec{y} .

Фазовые структуры зондирующих световых полей в каждой проекции будут определяться как

$$\Delta \varphi_q(x_q, y) = \frac{2\pi}{\lambda} \int_{z'}^{z''} \left[n(x_q, y, z_q) - n_{\infty} \right] dz_q ,$$

где λ – длина волны источника излучения; $n(x_q, y, z_q)$ – показатель преломления неоднородности в точке; (x_q, y, z_q) n_{∞} – показатель преломления невозмущенной среды; z' и z'' – точки входа и выхода луча из объекта для определенной проекции.

В результате на выходе оптической системы для каждой q-й проекции в точке x_q^* формируется изображение гильбертограммы:

$$H\left[\Delta\varphi_q\right]\left(x_q^*\right) = \left\{\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\cos\left[\Delta\varphi_q(x_q, y)\right]}{x_q^* - x_q}dx_q\right\}^2 + \left\{\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\left[\Delta\varphi_q(x_q, y)\right]}{x_q^* - x_q}dx_q\right\}^2.$$

На рис. 3 представлен пример гильберт-визуализации изотермического течения струи фреона-22, вытекающей из трубки эллиптического сечения в неподвижный воздух, где последовательно показаны боковая проекция струи $\psi = \pi/2$, проекция для $\psi = 3\pi/4$, фронтальная проекция $\psi = 0$ и проекция под углом $\psi = \pi/4$.



Рис. 3 – Четырехракурсная гильберт-визуализация изотермического течения струи фреона-22, вытекающей из трубки эллиптического сечения

Fig. 3 – Four-angle Hilbert visualization of the isothermal flow of a freon-22 jet flowing out of an elliptical tube

2. Итерационный алгоритм Гершберга-Папулиса

Восстановление значения фазовой функции $\Delta \phi$ и, соответственно, показателя преломления *n* исследуемой среды по четырем проекциям гильберт-изображений сводится к решению задачи сверхмалоракурсной томографии, где необходимо применять итерационные алгоритмы, использующие максимум априорной информации об объекте [12]. Одним из наиболее популярных методов является итерационная схема Гершберга–Папулиса [13–15], которую можно представить как итерационные переходы от оценки объекта в спектральной плоскости к его оценке в пространственной области с внесением в процессе их выполнения априорной информации о каждой из областей. В результате необходимо выполнить следующие операции.

1. По известным данным Радона вычисляются одномерные фурье-образы, таким образом определяется функция S_q , равная значениям двумерного преобразования Фурье от искомой функции на направлениях, соответствующих углам проекций, и равная нулю в остальных точках фурье-плоскости.

2. Определяется начальное приближение n_0 : выполняется обратное двумерное преобразование Фурье от функции S_q и вносится априорная информация о положительности показателя преломления n и ограниченности области его задания (применяется оператор C_q).

3. Выполняется двумерное преобразование Фурье от начального приближения, и значения спектра на направлениях, соответствующих углам проекций, заменяются значениями, вычисленными на шаге 1.

4. Выполняется обратное двумерное преобразование Фурье от полученной на предыдущем шаге функции и к результату применяется оператор C_q .

5. Проверяются критерии окончания итерационной процедуры. Если они не выполняются, то повторяются шаги 3, 4. Критериями окончания итерационной процедуры могут быть малость нормы отклонения полученной функции от ее значений на предыдущем шаге; равенство нормы отклонения фурье-спектра полученной функции на направлениях, соответствующих углам проекций, норме шума в данных Радона (критерий невязки).

Таким образом, итерационный алгоритм Гершберга–Папулиса можно представить как

$$\begin{split} \Phi^{0} &= S_{q} , \qquad n^{0} = C_{q} F^{-1}[\Phi^{0}] , \\ \Phi^{i+1} &= S_{q} + F^{+1}[n^{i}](1 - H_{q}) , \\ n^{i+1} &= C_{q} F^{-1}[\Phi^{i+1}] , \end{split}$$

 F^{+1} и F^{-1} – операторы прямого и обратного двумерных преобразований Фурье, H_q – характеристическая функция направлений для q проекций: $H_q(K_x, K_y) = 1$ при $K_y = K_x \text{tg} \psi_q$ и $H_q(K_x, K_y) = 0$ при $K_y \neq K_x \text{tg} \psi_q$, где K_x и K_y – пространственные частоты.

В результате многократного выполнения операций с третьей по пятую реконструируется функция показателя преломления.

Заключение

В работе рассматривается метод малоракурсной гильберт-томографии полей фазовой оптической плотности на примере неосесимметричного струйного течения газа. Оптическая система, выполнять четырехракурсное зондированного теневого прибора ИАБ-463М, позволяет выполнять четырехракурсное зондирование исследуемого объекта с одновременной регистрацией томографических проекций в виде гильберт-изображений. Выбор технического решения томографа обусловлен возможностью использования большого поля зрения (400 мм) теневого прибора ИАБ-463М. Приведены экспериментально полученные гильбертограммы газовой струи фреона-22, вытекающей из трубки эллиптического сечения в неподвижный воздух. Для восстановления требуемых параметров в исследуемых объектах по данным гильберт-томографии в дальнейшем предлагается использование итерационного метода Гершберга–Папулиса, который является перспективным для восстановления томограмм при сверхмалом числе проекций.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Yang W.Q., Liu S. Role of tomography in gas/solids flow measurement // Flow Measurement and Instrumentation. 2000. Vol. 11 (3). P. 237–244. DOI: 10.1016/S0955-5986(00)00023-6.
- Measurement of fluid-flow-velocity profile in turbid media by the use of optical Doppler tomography / X. Wang, T.E. Milner, Z. Chen, J.S. Nelson // Applied Optics. – 1997. – Vol. 36 (1). – P. 144–149. – DOI: 10.1364/AO.36.000144.
- 3. Bulba A.V. Application of optical tomography for the research of dusty plasma structures // IEEE Transactions on Plasma Science. 2011. Vol. 39 (11). P. 2728–2729. DOI: 10.1109/TPS.2011.2140133.
- Tomography-based pore level analysis of combined conductive-radiative heat transfer in an open-cell metallic foam / C. Fan, X.-L. Li, X.-L. Xia, C. Sun // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2020. – Vol. 159. – P. 120122. – DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer. 2020.120122.
- Optical tomography of phase objects by holographic interferometry / H. Philipp, T. Neger, H. Jäger, J. Woisetschläger // Measurement. – 1992. – Vol. 10 (4). – P. 170–181. – DOI: 10.1016/0263-2241(92)90026-Z.
- 6. **Терещенко С.А.** Трансмиссионная томография пропорциональных рассеивающих сред // Журнал технической физики. 2008. Т. 78 (7). С. 69–75.
- Hilbert-optic diagnostics of hydrogen-oxygen inverse diffusion flame / V.A. Arbuzov, E.V. Arbuzov, Yu.N. Dubnishchev, O.S. Zolotukhina, V.V. Lukashov, A.V. Tupikin // Energies. – 2022. – Vol. 15 (24). – P. 9566. – DOI: 10.3390/en15249566.
- 8. Полихроматическая диагностика пламени с гильберт-верификацией визуализированной фазовой структуры / Ю.Н. Дубнищев, В.А. Арбузов, Э.В. Арбузов, О.С. Золотухина, В.В. Лукашов // Научная визуализация. – 2021. – № 13 (4). – С. 1–8.
- Дубнищев Ю.Н. Теория и преобразование сигналов в оптических системах. СПб.: Лань, 2011. – 368 с.
- 10. Васильев Л.А. Теневые методы. М.: Наука, 1968. 400 с.
- 11. Левин Г.Г., Вишняков Г.Н. Оптическая томография. М.: Радио и связь, 1989. 224 с.
- 12. Пикалов В.В., Мельникова Т.С. Низкотемпературная плазма. Т. 13. Томография плазмы. Новосибирск: Наука, 1995. 229 с.
- 13. **Papoulis A.** A new algorithm in spectral analysis and band-limited extrapolation // IEEE Transactions on Circuits and Systems. 1975. Vol. 22 (9). P. 735–742.
- Пикалов В.В., Казанцев Д.И. Свойства регуляризованного алгоритма Гершберга– Папулиса в задаче веерной томографии // Вычислительные технологии. – 2008. – Т. 13 (6). – С. 121–133.
- Pickalov V.V., Kazantsev D.I. New iterative reconstruction methods for fan-beam tomography // Inverse Problems in Science and Engineering. – 2018. – Vol. 26 (2). – P. 773–791. – DOI: 10.1080/17415977.2017.1340946.

OPTICAL HILBERT TOMOGRAPHY OF GAS JETS

Arbuzov V.A.¹, Arbuzov E.V.^{1,2}, Dubnishchev Yu.N.¹, Zolotukhina O.S.¹, Lukashov V.V.¹

¹ Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS, Novosibirsk, Russia
 ² Sobolev Institute of Mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russia

Hilbert-optics and signal conversion methods form the basis for modern information and measurement technologies. The Hilbert transform in the frequency space is physically reduced to a certain phase transformation of the Fourier spectrum of the signal in a wide frequency band. The article discusses the possibility of Hilbert tomography using the example of studying the isothermal flow of a freon-22 jet. An optical system based on the IAB-463M modernized wide-aperture shadow device has been developed. This system makes it possible to perform four-angle diagnostics of the studied phase object using probing light beams. The beams orientation is defined at angles of 0, $\pi/2$, $\pi/4$ and $3\pi/4$ to the optical axis of the shadow device. This makes it possible to simultaneously register all four tomographic projections in the form of Hilbert images in separate sections of the CCD-matrix of the high-speed camera. The use of the iterative Gershberg-Papulis scheme for finding the parameters of the medium under study based on Hilbert tomography data is further proposed. This algorithm for reconstructing a function from its Radon data obtained by a limited number of projections consists in iterative transitions from estimating the function in the Fourier plane to its estimate in the spatial domain, corrected based on a priori information. The spectrum of the restored function is determined on the entire frequency plane as a result of an iterative process, which makes it possible to determine the values of the required function.

Keywords: Optical tomography, Gershberg-Papoulis method, Hilbert transform, nondisturbing diagnostics, isothermal flow, gas jet.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-59-66

REFERENCES

- 1. Yang W.Q., Liu S. Role of tomography in gas/solids flow measurement. *Flow Measurement and Instrumentation*, 2000, vol. 11 (3), pp. 273–244. DOI: 10.1016/S0955-5986(00)00023-6.
- Wang X., Milner T.E., Chen Z., Nelson J.S. Measurement of fluid-flow-velocity profile in turbid media by the use of optical Doppler tomography. *Applied Optics*, 1997, vol. 36 (1), pp. 144–149. DOI: 10.1364/AO.36.000144.
- 3. Bulba A.V. Application of optical tomography for the research of dusty plasma structures. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2011, vol. 39 (11), pp. 2728–2729. DOI: 10.1109/ TPS.2011.2140133.
- Fan C., Li X.-L., Xia X.-L., Sun C. Tomography-based pore level analysis of combined conductive-radiative heat transfer in an open-cell metallic foam. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, vol. 159, p. 120122. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120122.
- Philipp H., Neger T., Jäger H., Woisetschläger J. Optical tomography of phase objects by holographic interferometry. *Measurement*, 1992, vol. 10 (4), pp. 170–181. DOI: 10.1016/0263-2241(92)90026-Z.
- 6. Tereshchenko S.A. Transmission tomography of proportional scattering media. *Technical Physics*, 2008, vol. 53, pp. 887–893. Translated from *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki*, 2008, vol. 78 (7), pp. 69–75.
- Arbuzov V.A., Arbuzov E.V., Dubnishchev Yu.N., Zolotukhina O.S., Lukashov V.V., Tupikin A.V. Hilbert-optic diagnostics of hydrogen-oxygen inverse diffusion flame. *Energies*, 2022, vol. 15 (24), p. 9566. DOI: 10.3390/en15249566.
- Dubnishchev Yu.N., Arbuzov V.A., Arbuzov E.V., Zolotukhina O.S., Lukashov V.V. Polikhromaticheskaya diagnostika plameni s gil'bert-verifikatsiei vizualizirovannoi fazovoi struktury [Polychromatic diagnostics of the flame with Hilbert verification of the visualized phase structure]. *Nauchnaya vizualizatsiya = Scientific Visualization*, 2021, vol. 13 (4), pp. 1–8.
- 9. Dubnishchev Yu.N. *Teoriya i preobrazovanie signalov v opticheskikh sistemakh* [Theory and conversion of signals in optical systems]. St. Petersburg, Lan' Publ., 2011. 368 p.

- 10. Vasiliev L.A. Tenevye metody [Shadow methods]. Moscow, Nauka Publ., 1968. 400 p.
- 11. Levin G.G., Vishnyakov G.N. *Opticheskaya tomografiya* [Optical tomography]. Moscow, Radio i svyaz' Publ., 1989. 224 p.
- Pikalov V.V., Mel'nikova T.S. Nizkotemperaturnaya plazma. T. 13. Tomografiya plazmy [Low temperature plasma. Vol. 13. Plasma tomography]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1995. 229 p.
- 13. Papoulis A. A new algorithm in spectral analysis and band-limited extrapolation. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 1975, vol. 22 (9), pp. 735–742.
- Pikalov V.V., Kazantsev D.I. Svoistva regulyarizovannogo algoritma Gershberga–Papulisa v zadache veernoi tomografii [Properties of the regularized Gershberg–Papoulis algorithm in a fan-beam type tomography]. Vychislitel'nye tekhnologii = Computational Technologies, 2008, vol. 13 (6), pp. 121–133.
- Pikalov V.V., Kazantsev D.I. New iterative reconstruction methods for fan-beam tomography. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 2018, vol. 26 (2), pp. 773–791. DOI: 10.1080/17415977.2017.1340946.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Арбузов Виталий Анисифорович – родился в 1946 году, д-р техн. наук, ведущий научный сотрудник, лаборатория физических основ энергетических технологий 7.4, Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН. Область научных интересов: оптические измерительные технологии, оптическая обработка информации, оптическая диагностика потоков. Опубликовано 200 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т ак. Лаврентьева, 1. Е-mail: arbuzov@itp.nsc.ru).

Arbuzov Vitaly Anisiforovich (b. 1946) Doctor of Sciences (Eng.), leading researcher, laboratory of physical foundations of energy technologies 7.4, Kutateladze Institute of Thermophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. His research interests are currently focused on optical measuring technologies, optical information processing, and flow optical diagnostics. He is the author of 200 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Av., Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: arbuzov@itp.nsc.ru).



Арбузов Эдуард Витальевич – родился в 1968 году, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, лаборатория условно-корректных задач У1, Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН. Область научных интересов: обратные и некорректные задачи, обработка изображений, томография. Опубликовано 50 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т ак. Коптюга, 4. E-mail: arbuzov@math.nsc.ru).

Arbuzov Eduard Vitalievich (b. 1968) – Candidate of Sciences (Phys. & Math.), senior researcher, laboratory of conditionally correct problems U1, Sobolev Institute of Mathematics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. His research interests are currently focused on inverse and ill-posed problems, and image processing, tomography. He is the author of 50 scientific papers. (Address: 4, Ac. Koptyug Av., Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: arbuzov@math.nsc.ru).



Дубнищев Юрий Николаевич – родился в 1941 году, д-р техн. наук, профессор, главный научный сотрудник, Лаборатория физических основ энергетических технологий 7.4, Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН. Область научных интересов: оптические измерительные технологии, оптическая обработка информации, оптическая диагностика потоков. Опубликовано 284 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т ак. Лаврентьева, 1. E-mail: dubnistchev@itp.nsc.ru). **Dubnishchev Yuri Nikolaevich** (b. 1941) – Doctor of Sciences (Eng.), professor, chief researcher, laboratory of physical foundations of energy technologies 7.4, Kutateladze Institute of Thermophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. His research interests are currently focused on optical measuring technologies, optical information processing, and flow optical diagnostics. He is the author of 284 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Prospekt, Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: dubnistchev@itp.nsc.ru).



Золотухина Ольга Сергеевна – родилась в 1994 году, канд. техн. наук, инженер-исследователь, лаборатория физических основ энергетических технологий 7.4, Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН. Область научных интересов: оптические измерительные технологии, гильберт-оптика. Опубликовано 34 научные работы. (Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т ак. Лаврентьева, 1. E-mail: melexina-olga17@ya.ru).

Zolotukhina Olga Sergeevna (b. 1994) – Candidate of Sciences (Eng.), research engineer, laboratory of physical foundations of energy technologies 7.4, Kutateladze Institute of Thermophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. Her research interests are currently focused on optical measurement technologies and Hilbert optics. She is the author of 34 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Av., Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: melexina-olga17@ya.ru).



Лукашов Владимир Владимирович – родился в 1966 году, канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник, Лаборатория физических основ энергетических технологий 7.4, Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН. Область научных интересов: динамика сплошной среды, тепломассообмен, химические и фазовые превращения. Опубликовано 105 научных работ. (Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, пр-т ак. Лаврентьева, 1. E-mail: luka@itp.nsc.ru).

Lukashov Vladimir Vladimirovich (b. 1966) – Candidate of Sciences (Eng.), leading researcher, laboratory of physical foundations of energy technologies 7.4, Kutateladze Institute of Thermophysics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences. His research interests are currently focused on continuum dynamics, heat and mass transfer, and chemical and phase transformations. He is the author of 105 scientific papers. (Address: 1, Ac. Lavrentiev Av., Novosibirsk, 630090, Russia. E-mail: luka@itp.nsc.ru).

Статья поступила 05 июня 2023 г. Received June 05, 2023

To Reference:

Arbuzov V.A., Arbuzov E.V., Dubnishchev Yu.N., Zolotukhina O.S., Lukashov V.V. Opticheskaya gil'bert-tomografiya gazovykh strui [Optical Hilbert tomography of gas jets]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 3 (60), pp. 59–66. DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-59-66.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

июль-сентябрь

№ 3 (60)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 621.396.67

2023

ФОРМИРОВАНИЕ МАКСИМУМА НАПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ЗАДАННОЙ ТОЧКЕ ПРОСТРАНСТВА СФОКУСИРОВАННОЙ ЛИНЕЙНОЙ АНТЕННОЙ РЕШЕТКОЙ

Д.А. Юзвик, М.А. Степанов

Новосибирский государственный технический университет

Рассмотрена возможность формирования максимума напряженности электрического поля в заданной точке пространства с помощью сфокусированной одномерной линейной антенной решетки. Показано, что местоположение максимума напряженности электрического поля не совпадает с точкой синфазного сложения электромагнитных волн, излученных элементами антенной решетки – точкой фокусировки. Представлена зависимость величины смещения максимума напряженности электрического поля от точки фокуса для различных фокусных расстояний и размеров антенных решеток. Установлено, что величина смещения по координатам фокусировки определяется только размером антенной решетки и не зависит от количества ее элементов. Описана связь между снижением интенсивности электромагнитной волны и смещением максимума амплитуды напряженности электрического поля. В работе представлены зависимости амплитуды напряженности электрического поля для антенных решеток различных линейных размеров, результаты расчетов подтвердили теоретические представления. Представлен фазовый портрет для антенных решеток различных размеров, показывающий синфазный приход волн в заданную точку пространства. Согласно семейству зависимостей, представленных в работе, можно сделать вывод, что чем больше отношение линейных размеров антенной решетки к фокусному расстоянию, тем меньше величина смещения максимума амплитуды напряженности электрического поля.

Ключевые слова: антенные решетки, фокусировка линейных антенных решеток, обеспечение максимума амплитуды напряженности электрического поля.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-67-79

Введение

Формирование максимума амплитуды напряженности электрического поля для излучения сетей беспроводной передачи данных является перспективным способом пространственной селекции устройств-абонентов. Целью пространственной селекции является снижение уровня взаимных помех между устройствами-абонентами беспроводных телекоммуникационных сетей. Следствием этого является увеличение скорости передачи информации в такой сети.

На данный момент известны представления полной конфигурации антенной решетки (полная конфигурация – это конфигурация антенной решетки, состоящей из четырех линейных антенных решеток, которые расположены ортогонально относительно соседних) в виде отдельных линейных парциальных антенных решеток [1–3], что существенно упрощает их анализ, в частности хорошо известны способы управления диаграммой направленности [4, 5] линейной эквидистантной антенной решетки, известны способы получения желаемого уровня боковых лепестков, и также известно влияние расстояния между излучателями в линейной эквидистантной антенной решетки на возникновение дифракционных максимумов в диаграмме направленности. Известно, что расстояние между антенными излучателями в линейной антенной решетке влияет на вид диаграммы направленности, на характер дифракционных лепестков [6].

© 2023 Юзвик Д.А., Степанов М.А.

Актуальна задача фокусировки излучения линейных антенных решеток на заданное конечное расстояние [7]. При этом обеспечивается синфазное сложение электромагнитных волн, излученных всеми элементами антенной решетки в заданной точке пространства. Традиционно эту возможность используют в задачах, требующих сохранения диаграммы направленности антенны в ближней или промежуточной зоне. Отклонение от точки фокусировки, очевидно, приводит к искажениям диаграммы направленности [8–11]. Как правило, исследование антенных решеток, сфокусированных на конечное расстояние, ограничено вопросами определения размера области пространства вблизи точки фокусировки, в пределах которой диаграмма направленности искажается в приемлемых пределах.

Вместе с тем исследователи отмечают, что в окрестности точки фокусировки наблюдается возрастание напряженности электрического поля относительно уровня, характерного в этой точке для антенной решетки, сфокусированной на бесконечное расстояние [7]. Это объясняется синфазным сложением электромагнитных волн от элементов парциальной решетки. Очевидно, что повышение напряженности электрического поля в заданной точке может быть использовано и при формировании максимума амплитуды напряженности электрического поля для излучения беспроводных сетей передачи данных для улучшения отношения сигнал/шум в заданной области.

Цель настоящей работы: оценить возможность формирования максимума напряженности электрического поля в заданной точке пространства с помощью сфокусированной линейной антенной решетки. Подтвердить, что задачи по фокусировке антенной решетки (обеспечение синфазного сложения волн в заданной точке пространства) и формирование максимума амплитуды напряженности электрического поля в заданной точке пространства необходимо разделять.

1. Формирование максимума амплитуды напряженности электрического поля в одной точке пространства

Фокусировка электромагнитного поля в пространстве является следствием физического явления – интерференции. Интерференцией называют взаимодействие нескольких когерентных электромагнитных волн. Когерентностью в данном случае называют случай, когда разность фаз между несколькими электромагнитными волнами постоянна во времени, т. е. электромагнитные волны имеют равную частоту (длину волны).

Традиционно формулируемая задача фокусировки излучения антенной решетки в заданную точку предполагает обеспечение синфазности в этой точке электромагнитных волн, сформированных элементами решетки.

Рассмотрим изменение амплитуды напряженности электрического поля в зависимости от дальности до антенной решетки. Электромагнитная волна характеризуется плотностью потока мощности, которая, усредненная по промежутку времени, называется интенсивностью электромагнитного излучения [12]:

$$I = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} \frac{dP}{dS} dt = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} |\vec{\Pi}(t)| dt,$$
(1)

где T – промежуток времени усреднения; dS – площадь, через которую переносится энергия; P – мощность электромагнитной волны; $|\vec{\Pi}(t)|$ – модуль вектора Пойнтинга. Поток мощности, исходящий от источника, можно представить в виде некоторого количества линий, которые выходят из него, а количество линий будет зависеть от излучаемой мощности источника [12–15]. В свободном пространстве $(\varepsilon_r = 1; \mu_r = 1)$ количество линий потока от источника не зависит от расстояния от источника, линии потока мощности распространяются в трехмерном пространстве. Чем дальше от источника линии потока мощности, тем через бо́льшую площадь поверхности они проходят, которая связана с площадью сферы $(S_{cdb} = 4\pi r^2)$.

Учитывая, что амплитуда и мощность связаны между собой соотношением $A = \sqrt{P \cdot Z}$, где P – мощность, Z – электрический импеданс, то становится ясно, что в дальней зоне мощность с ростом расстояния снижается в r^{-2} раз, тогда амплитуда напряженности электрического поля будет снижаться в r^{-1} раз.

Таким образом, можно записать выражение, связывающее амплитуду напряженности электрического поля и расстояние до антенной решетки (без учета фазы):

$$A(r) = A_0 r^{-q},$$
 (2)

где A_0 – начальное (в точке излучения) значение амплитуды напряженности электрического поля; q – величина, устанавливающая, по какому закону происходит спад амплитуды напряженности электрического поля. В ближней зоне q = 2, в дальней зоне q = 1 [1, 6]. При q = 0 амплитуда напряженности электрического поля не изменяется с ростом расстояния.

Проведем оценки зависимости амплитуды напряженности электрического поля от расстояния до антенной решетки малого размера. Расчет выполним для антенной решетки, сфокусированной на бесконечность (начальные фазы сигналов, подводимых ко всем излучателям, равны друг другу) и сфокусированной в заданную точку пространства. Количество элементов рассматриваемой антенной решетки N = 5, расстояние между излучателями $d = 60 \text{ мм} \left(\frac{d}{\lambda} = 0, 5\right)$. Расчет произведем с учетом эффекта снижения интенсивности напряженности электрического поля в зависимости от дальности до антенной решетки (q = 1) и для гипотетического случая, не учитывающего снижения интенсивности (q = 0). На рис. 1 представлены зависимости электрического поля от расстояния для антенной решетки, сфокусированной на бесконечность (сплошная линия с учетом эффекта снижения интенсивности q = 0). Из рис. 1 видно, что, как и ожидалось, при q = 0 амплитуда напряженности электрического поля не меняется с расстоянием от антенной решетки.

Для фокусировки антенной решетки в заданную точку необходимо рассчитать по выражению (3) расстояние между каждым антенным излучателем и точкой фокусировки. Исходя из рассчитанного расстояния по выражению (4) определяются начальные фазы сигналов [7].

$$x_n = \sqrt{F^2 + (n - N/2)^2 d^2} - F,$$
(3)

где *F* – расстояние между геометрическим центром антенной решетки и точкой в пространстве, в которой необходимо обеспечить приход сигналов синфазно;



n – номер излучателя; *d* – расстояние между излучателями; *N* – количество излучателей антенной решетки

$$\phi_n = x_n \cdot \frac{2\pi}{\lambda}.\tag{4}$$

Рис. 1 –Зависимость амплитуды напряженности электрического поля от расстояния для антенной решетки, сфокусированной на бесконечность

Fig. 1 – Dependence of the amplitude of the electric field strength on the distance for an antenna array focused to infinity

Проведем расчет зависимости амплитуды напряженности от расстояния до антенной решетки, сфокусированной на конечное расстояние. Расчет, как и прежде, проведем с учетом эффекта снижения интенсивности напряженности электрического поля от расстояния и без него. Фокусное расстояние 800 мм. Результат расчета приведен на рис. 2.

На рис. 2 видно, что для q = 1 явно выраженного максимума амплитуды напряженности электрического поля в окрестностях точки фокусировки нет. Это объясняется снижением интенсивности с ростом дальности от решетки. Амплитуда напряженности электрического поля обратно пропорциональна расстоянию от антенной решетки. При отсутствии эффекта снижения интенсивности (q = 0) наблюдается максимум напряженности электрического поля точно в заданной точке фокусировки. При этом, сравнивая фазовые портреты для случая с наличием эффекта снижения интенсивности (рис. 3, a) и для случая без его учета (рис. 3, δ), мы наблюдаем, что электромагнитные волны приходят синфазно точно в координаты фокусировки (800 мм). В точке фокусировки амплитуда напряженности электрического поля для антенной решетки, сфокусированной на бесконечность, меньше на 0,17 дБ по сравнению с антенной решеткой, сфокусированной на конечное расстояние.

Фактически, фокусировка в рассматриваемую точку для такой антенной решетки не дает выигрыша в напряженности в сравнении с антенной решеткой, сфокусированной на бесконечность.


Рис. 2 –Зависимость амплитуды напряженности электрического поля от расстояния для антенной решетки, сфокусированной на расстояние 800 мм







$$N = 5; a - q = 1; \delta - q = 0$$

Fig. 3 – A phase portrait for an antenna array focused at a distance of 800 mm: N = 5; a - q = 1; b - q = 0

Известны способы фокусировки одномерных антенных решеток в заданную точку [7, 16–21], в них получают ожидаемый нами результат – наблюдается максимум напряженности электрического поля. Однако в рассмотренных способах используются антенные решетки с большим количеством излучателей.

На рис. 4 представлена зависимость амплитуды напряженности электрического поля от расстояния для большой антенной решетки (N = 50, d = 60 мм), сфокусированной на бесконечность. На том же рисунке представлены зависимости амплитуды напряженности электрического поля от расстояния для той же антенной решетки, сфокусированной на расстояние 3000 мм, с наличием эффекта снижения интенсивности (q = 1) и без учета его (q = 0).



Рис. 4 – Зависимость амплитуды напряженности электрического поля от расстояния. N = 50

Fig. 4 – Dependence of the amplitude of the electric field strength on the distance. N = 50

Исходя из результатов расчетов, показанных на рис. 4, видно, что при фокусировке больших антенных решеток наблюдается максимум напряженности электрического поля в окрестностях точки фокуса. Однако местоположение этого максимума не совпадает с точкой фокусировки. Он оказывается смещен от точки фокуса в сторону антенной решетки. Объясняется это снижением интенсивности с изменением расстояния. Фактически, сдвиг максимума напряженности происходит из-за противоборства двух физических явлений. С одной стороны, по мере приближения к точке фокуса фазы электромагнитных волн, излученных элементами антенной решетки, сближаются, что приводит к росту суммарной напряженности. С другой стороны, наблюдается спад напряженности из-за множителя 1/r. Схематично это проиллюстрировано на рис. 5. Очевидно, что чем больше элементов в антенной решетке, тем сильнее первый процесс – максимум напряженности электрического поля в этом случае будет ближе к точке фокусировки (точке синфазного сложения).

Для того, чтобы оценить влияние размеров антенной решетки на смещение максимума амплитуды напряженности электрического поля, проведем расчет двух зависимостей для антенных решеток, параметры которых представлены в таблице.

1. Зависимость амплитуды напряженности электрического поля от расстояния для антенных решеток, имеющих разное количество излучателей, но равные линейные размеры (антенные решетки 1–3 в таблице). Результат представлен на рис. 6.

2. Зависимость амплитуды напряженности электрического поля для антенных решеток, имеющих разное количество излучателей, но постоянный шаг между излучателями (антенные решетки 4–6 в таблице). Результат представлен на рис. 7.

Во всех расчетах полагалось, что точка фокусировки расположена на расстоянии 800 мм от антенной решетки и мощности, излучаемые всеми антенными решетками, равны между собой.



Рис. 5 – К пояснению смещения максимума напряженности электрического поля относительно точки фокусировки

Fig. 5 – Explanation of the displacement of the maximum electric field strength relative to the focusing point

Параметры рассматриваемых антенных решеток Parameters of the antenna arrays being studied

N⁰	Ν	d
1	10	$\lambda/2$
2	5	λ
3	3	32/2
4	12	$\lambda/2$
5	15	$\lambda/2$
6	20	$\lambda/2$



Рис. 6–Зависимость амплитуды напряженности электрического поля для антенных решеток, имеющих равные линейные размеры

Fig. 6 – Dependence of the amplitude of the electric field strength for antenna arrays having equal linear dimensions

Исходя из результатов, показанных на рис. 6, понятно, что зависимость амплитуды напряженности электрического поля от дальности до антенной решетки практически не отличается для антенных решеток, имеющих разное количество излучателей, но равный линейный размер (мощности, излучаемые каждой из трех антенных решеток равны между собой). В точке фокуса во всех трех случаях формируется одинаковое значение напряженности электрического поля. Стоит отметить, что антенная решетка, содержащая большее количество излучающих элементов, обеспечивает больший градиент амплитуды напряженности электрического поля в точке фокусировки. В целом можно утверждать, что уровень напряженности в точке фокуса определяется размером антенной решетки и не зависит от количества излучателей в ней.

Это утверждение несложно подтвердить аналитически. Для антенной решетки, состоящей из N излучателей, амплитуда суммарного сигнала в точке фокусировки определяется выражением

$$A_{\Sigma} = \left| \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{r_n} A_n e^{j \cdot \phi_n} \right|, \tag{5}$$

где r_n – расстояние от *n*-го излучателя антенной решетки до точки фокусировки; A_n – амплитуда сигнала, излучаемого *n*-м элементом антенной решетки; ϕ_n – фаза в точке фокусировки сигнала, излученного *n*-м элементом антенной решетки.

С учетом того, что в точке наблюдения сигналы всех элементов антенной решетки складываются синфазно ($\phi_n = \phi$), а также принимая излучаемую мощность постоянной при любом количестве элементов антенной решетки $\left(A_n^2 = \frac{1}{N}\right)$, выражение (5) можно записать в следующем виде:

$$A_{\Sigma} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{1}{r_n} e^{j\phi}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{r_n^2}}.$$
 (6)

В выражении (6) под корнем стоит среднее значение величины, обратной квадрату расстояния от элемента антенной решетки до точки фокуса величины $\frac{1}{r^2}$. Несложно убедиться, что при фиксированной длине эквидистантной антенной решетки (L = Nd = const) расчет по выражению (6) будет давать постоянное значение для любых сочетаний N и d.

Оценим максимальную величину A_{Σ} . При заданном фокусном расстоянии величина A_{Σ} определяется размером антенной решетки. При возрастании размера антенной решетки среднее расстояние до ее элементов увеличивается. Как следует из (6), это приведет к снижению амплитуды напряженности электрического поля в точке фокусировки. Можно записать нестрогое неравенство, определяющее максимальную амплитуду напряженности электрического поля в точке фокусировки для сфокусированных линейных антенных решеток:

$$A_{\Sigma} \le \frac{1}{F}.$$
(7)

Знак равенства в (7) справедлив для антенной решетки, состоящей из одного излучателя. При этом среднее расстояние до элемента антенной решетки равно

фокусному расстоянию. Это означает, что напряженность электрического поля, формируемая сфокусированной антенной решеткой, будет всегда меньше напряженности, формируемой одиночным излучателем, при равных излучаемых мощностях.



Рис. 7 – Зависимость амплитуды напряженности электрического поля, для антенных решеток, имеющих разные линейные размеры



Исходя из результатов, показанных на рис. 7, можно заметить следующее.

1. При фокусировке линейной антенной решетки в заданную точку максимум амплитуды напряженности электрического поля формируется не в точке синфазного сложения волн, излученных элементами антенной решетки (точка фокусировки), а смещен в сторону к антенной решетке.

2. Чем больше размер антенной решетки, тем меньше смещение максимума напряженности электрического поля от точки фокусировки при фиксированном ее положении.

Результат расчета величины смещения точки, в которой расположен максимум напряженности электрического поля от точки синфазного сложения электромагнитных волн, представлен на рис. 8. Из рисунка видно, что при увеличении размера антенной решетки относительно фокусного расстояния величина ошибки позиционирования максимума напряженности электрического поля снижается. Для малых фокусных расстояний величина ошибки позиционирования максимума выше. Это объясняется более быстрым спадом напряженности электрического поля вблизи антенной решетки.

Для совмещения максимума напряженности электрического поля и точке фокусировки линейной антенной решетки требуется антенная решетка размером, значительно превышающим фокусное расстояние. Так, из рис. 8 видно, что даже для обеспечения ошибки позиционирования в 10 % от величины фокусного расстояния требуется антенная решетка, размер которой будет больше фокусного расстояния.

Важно отметить, что полученные кривые не зависят от количества излучателей, составляющих антенную решетку, а определяются только размером антенной решетки, т. е. разносом ее крайних излучателей.



Рис. 8 – Зависимость величины смещения максимума амплитуды напряженности электрического поля от линейных размеров антенной решетки

Заключение

1. При фокусировке линейных антенных решеток в заданную точку наблюдается смещение максимума напряженности электрического поля в направлении к антенной решетке, обусловленное снижением амплитуды напряженности электрического поля при удалении от источника излучения.

2. Смещение максимума напряженности электрического поля тем сильнее, чем меньше размер антенной решетки. Для антенной решетки большого размера (кратно превышающего величину фокусного расстояния) смещение не превышает единиц процентов от фокусного расстояния.

3. Одномерные антенные решетки при фокусировке в заданную точку пространства не обеспечивают совмещения точки максимума напряженности электрического поля и точки синфазного сложения электромагнитных волн.

4. Необходимо разделять задачи по фокусировке антенной решетки (обеспечение синфазного сложения волн в заданной точке пространства) и формирование максимума амплитуды напряженности электрического поля в заданной точке пространства.

ЛИТЕРАТУРА

- Iuzvik D., Stepanov M. Focusing of the electromagnetic field in several given areas of space // Progress In Electromagnetics Research M. – 2022. – Vol. 113. – P. 11–22.
- Iuzvik D., Stepanov M. Decomposition of an antenna array focused at several space points // 2022 IEEE International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON). – IEEE, 2022. – P. 1020–1023.
- 3. Cai X., Gu X., Geyi W. Optimal design of antenna arrays focused on multiple targets // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 2020. Vol. 68 (6). P. 4593–4603.

Fig. 8 – Dependence of the displacement of the maximum amplitude of the electric field strength on the linear dimensions of the antenna array

- Способы изменения формы диаграммы направленности фазированной антенной решетки миллиметрового диапазона / В.И. Парфенов, И.Ф. Струков, Н.А. Кунаева, К.А. Струков // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Физика. Математика. – 2018. – № 1. – С. 35–43.
- Delos P., Broughton B., Kraft J. Phased array antenna patterns Part 1: Linear array beam characteristics and array factor // Analog Dialogue. – 2020. – Vol. 54 (2). – P. 1–8.
- 6. Сколник М.И. Справочник по радиолокации. М.: Техносфера, 2014. 456 с.
- 7. Смирнов В.Ю., Никитин О.Р. Линейные фазированные антенные решетки, сфокусированные в ближней зоне // Вестник РГРТУ. 2008. № 4 (26). С. 32–34.
- Антенны, сфокусированные в зоне ближнего излученного поля: основы теории и технические приложения / под общ. ред. Ю.Е. Седельникова и Н.А. Тестоедова. Красноярск: Сиб. гос. аэрокосм. ун-т им. М.Ф. Решетнева, 2015. – 308 с.
- 9. Низамутдинов Р.Р. Исследование характеристик линейных сфокусированных антенн для радиоволновых технологических и диагностических устройств: дис. ... канд. техн. наук. Казань, 2011. 155 с.
- 10. Халикова К.Н. Антенны, сфокусированные в области ближнего излученного поля для задач микроволновых технологий: дис. ... канд. техн. наук. Казань, 2017. 166 с.
- Chu H., Mishra G., Sharma S.K. Dual polarized wideband Vivaldi 4x4 subarray antenna aperture for 5G massive MIMO panels with simultaneous multiple beams // 2018 18th International Symposium on Antenna Technology and Applied Electromagnetics (ANTEM). – IEEE, 2018. – P. 1–2.
- 12. Poynting J.H. On the transfer of energy in the electromagnetic field // Philosophical Transactions of the Royal Society. 1884. Vol. 175. P. 343-361.
- Stratton J.A. Electromagnetic theory. New York: McGraw-Hill book company, inc., 1941.
 640 p.
- 14. Grant I., Phillips W. Electromagnetism. New York: Wiley, 1990. 544 p.
- 15. Griffiths D. Introduction to electrodynamics. Boston: Pearson, 2012. 596 p.
- Sun L., Li F. A near-field focused array antenna with reconfigurable elements // 2016 IEEE 5th Asia-Pacific Conference on Antennas and Propagation (APCAP). – IEEE, 2016. – P. 319–320.
- Huang R., Liu B. A near-field focused circular array based on dielectric resonator antenna // 2021 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation and USNC-URSI Radio Science Meeting (APS/URSI). – IEEE, 2021. – P. 1165–1166.
- Sohail M., Uyguroğlu R. Near field focused microstrip patch antenna array characteristics enhancement with parasitic patch elements // 2021 29th Signal Processing and Communications Applications Conference (SIU). – IEEE, 2021. – P. 1–4.
- Ju H.S., Cho Y. Radiation characteristics of near-field beam focusing for an active array antenna // 2018 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP). – IEEE, 2018. – P. 1–2.
- Focusing characteristics of near-field radiations from multi-panels of phased array of antennas in circularly cylindrical arrangement / H.-T. Chou, J.-W. Liu, C.-Y. Liu, P. Nepa // 2017 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP). – IEEE, 2017. – P. 1–2.
- 21. Jiang Y., Geyi W., Yang L. Circularly-polarized focused microstrip antenna arrays // IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters. 2015. Vol. 15. P. 52–55.

FORMATION OF THE MAXIMUM OF ELECTRIC FIELD STRENGTH AT A GIVEN SPACE POINT BY A FOCUSED LINEAR ANTENNA ARRAY

Iuzvik D.A., Stepanov M.A.

Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

The possibility of forming a maximum of the electric field strength at a given point in space with the help of a focused one-dimensional linear antenna array is considered. It is shown that the location of the maximum electric field strength does not coincide with the point of in-phase addition of electromagnetic waves emitted by the elements of the antenna array - the focusing point. The dependence of the shift of the maximum electric field strength on the focus point for various focal lengths and sizes of antenna arrays is presented. It has been found that the value of the shift in the focusing coordinates is determined only by the size of the antenna array and does not depend on the number of its elements. The relationship between a decrease in the intensity of an electromagnetic wave and a shift in the maximum amplitude of the electric field strength is described. The paper presents the dependences of the amplitude of the electric field strength for antenna arrays of various linear sizes and the calculation results confirmed the theoretical concepts. A phase portrait for antenna arrays of various sizes is presented showing the in-phase arrival of waves at a given point in space. According to the family of dependencies presented in the paper, it can be concluded that the greater the ratio of the linear dimensions of the antenna array to the focal length, the smaller the shift in the maximum amplitude of the electric field strength.

Keywords: antenna arrays, focusing of linear antenna arrays, ensuring the maximum amplitude of the electric field strength.

DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-67-79

REFERENCES

- 1. Iuzvik D., Stepanov M. Focusing of the electromagnetic field in several given areas of space. *Progress In Electromagnetics Research M*, 2022, vol. 113, pp. 11–22.
- 2. Iuzvik D., Stepanov M. Decomposition of an antenna array focused at several space points. 2022 IEEE International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON). IEEE, 2022, pp. 1020–1023.
- Cai X., Gu X., Geyi W. Optimal design of antenna arrays focused on multiple targets. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2020, vol. 68 (6), pp. 4593–4603.
- 4. Parfenov V.I., Strukov I.F., Kunaeva N.A., Strukov K.A. Sposoby izmeneniya formy diagrammy napravlennosti fazirovannoi antennoi reshetki millimetrovogo diapazona [Methods of change of the form of antenna pattern of phased array of a millimeter range]. Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika = Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics, 2018, no. 1, pp. 35–43.
- 5. Delos P., Broughton B., Kraft J. Phased array antenna patterns Part 1: Linear array beam characteristics and array factor. *Analog Dialogue*, 2020, vol. 54 (2), pp. 1–8.
- 6. Skolnik M.I. *Spravochnik po radiolokatsii* [Handbook of radar]. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2014. 456 p.
- Smirnov V.Yu., Nikitin O.R Lineinye fazirovannye antennye reshetki, sfokusirovan-nye v blizhnei zone [Linear phased antenna arrays focused in the near field]. Vestnik Ryazanskogo gosudarstvennogo radiotekhnicheskogo universiteta = Vestnik of Ryazan State Radio Engineering University, 2008, no. 4 (26), pp. 32–34.
- Sedel'nikov Yu.E., Testoedov N.A., eds. Antenny, sfokusirovannye v zone blizhnego izluchennogo polya: osnovy teorii i tekhnicheskie prilozheniya [Antennas focused in the zone of the near radiated field. Fundamentals of the theory and technical applications]. Krasnoyarsk, Siberian State Aerospace University Publ., 2015. 308 p.
- Nizamutdinov R.R. Issledovanie kharakteristik lineinykh sfokusirovannykh antenn dlya radiovolnovykh tekhnologicheskikh i diagnosticheskikh ustroistv. Diss. kand. tekhn. nauk [Study of the characteristics of linear focused antennas for radio wave technological and diagnostic devices. PhD eng. sci. diss.]. Kazan, 2011. 155 p.
- Khalikova K.N. Antenny, sfokusirovannye v oblasti blizhnego izluchennogo polya dlya zadach mikrovolnovykh tekhnologii. Diss. kand. tekhn. nauk [Antennas focused in the near radiated field for microwave technology applications. PhD eng. sci. diss.]. Kazan, 2017. 166 p.
- Chu H., Mishra G., Sharma S.K. Dual polarized wideband Vivaldi 4x4 subarray antenna aperture for 5G massive MIMO panels with simultaneous multiple beams. 2018 18th International Symposium on Antenna Technology and Applied Electromagnetics (ANTEM). IEEE, 2018, pp. 1–2.
- 12. Poynting J.H. On the transfer of energy in the electromagnetic field. *Philosophical Transactions of the Royal Society*, 1884, vol. 175, pp. 343–361.
- 13. Stratton J.A. *Electromagnetic theory*. New York, McGraw-Hill book company, inc., 1941. 640 p.

- 14. Grant I., Phillips W. Electromagnetism. New York, Wiley, 1990. 544 p.
- 15. Griffiths D. Introduction to electrodynamics. Boston, Pearson, 2012. 596 p.
- Sun L., Li F. A near-field focused array antenna with reconfigurable elements. 2016 IEEE 5th Asia-Pacific Conference on Antennas and Propagation (APCAP). IEEE, 2016, pp. 319– 320.
- Huang R., Liu B. A near-field focused circular array based on dielectric resonator antenna. 2021 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation and USNC-URSI Radio Science Meeting (APS/URSI). IEEE, 2021, pp. 1165–1166.
- Sohail M., Uyguroğlu R. near field focused microstrip patch antenna array characteristics enhancement with parasitic patch elements. 2021 29th Signal Processing and Communications Applications Conference (SIU). IEEE, 2021, pp. 1–4.
- 19. Ju H.S., Cho Y. Radiation characteristics of near-field beam focusing for an active array antenna. 2018 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP). IEEE, 2018, pp. 1–2.
- Chou H.-T., Liu J.-W., Liu C.-Y., Nepa P. Focusing characteristics of near-field radiations from multi-panels of phased array of antennas in circularly cylindrical arrangement. 2017 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP). IEEE, 2017, pp. 1–2.
- 21. Jiang Y., Geyi W., Yang L. Circularly-polarized focused microstrip antenna arrays. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 2015, vol. 15, pp. 52–55.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Юзвик Денис Андреевич – родился в 1994 году, аспирант кафедры РПиРПУ, НГТУ. Область научных интересов: моделирование антенных решеток, СВЧ-устройств, электромагнитных полей. Опубликовано 11 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: zetanicestar@gmail.com).

Juzvik Denis Andreevich (b. 1994) – postgraduate student of the department of Radio receiving and Radio transmitting devices at the Novosibirsk State Technical University. Research interests: modeling of antenna arrays, microwave devices, electromagnetic fields. Published 11 scientific papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: zetanicestar@gmail.com).



Степанов Максим Андреевич – д-р техн. наук, заведующий кафедрой РПиРПУ в Новосибирском государственном техническом университете. Область научных интересов: радиотехника. Опубликовано более 80 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: m.stepanov@corp.nstu.ru).

Stepanov Maksim Andreevich – Doctor of Sciences (Eng.), Head of the Department of Radio receiving and Radio transmitting devices at the Novosibirsk State Technical University. Research interests: radio engineering. More than 80 scientific papers have been published. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: m.stepanov@corp.nstu.ru).

Статья поступила 23 июня 2023 г. Received June 23, 2023

To Reference:

Iuzvik D.A., Stepanov M.A. Formirovanie maksimuma napryazhennosti elektricheskogo polya v zadannoi tochke prostranstva sfokusirovannoi lineinoi antennoi reshetkoi [Formation of the maximum of electric field strength at a given space point by a focused linear antenna array]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2023, no. 3 (60), pp. 67–79. DOI: 10.17212/1727-2769-2023-3-67-79.

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Выпуск 3 (60) июль-сентябрь 2023

Выпускающий редактор И.П. Брованова Корректор И.Е. Семенова Компьютерная верстка Н.В. Гаврилова

Налоговая льгота – Общероссийский классификатор продукции Издание соответствует коду 95 2000 ОК 005-93 (ОКП)

Подписано в печать 25.09.2023. Выход в свет 28.09.2023. Бумага офсетная. Формат 70×108 1/16 Тираж 300 экз. Уч.-изд. л. 7,0. Печ. л. 5,0. Изд. № 178. Заказ № 254. Цена свободная

Отпечатано в типографии Новосибирского государственного технического университета 630073, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20

16+

Индекс журнала в Роспечати 82961