

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-5-1065-1072

УДК 536.42

Оценка влияния степени заполнения реакционного тигля железо-олово на процессы тепло- и массопереноса в присутствии электрического тока высокой плотности

Владислав Евгеньевич Фомин¹✉, Анна Владимировна Новотельнова²,
Геннадий Александрович Болкунов³, Федор Юрьевич Бочканов⁴,
Дмитрий Юрьевич Карпенков⁵

^{1,2,3} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

^{4,5} Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, 119049, Российская Федерация

⁵ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Российская Федерация

¹ vladdisslav.fomin@yandex.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-8970-0809>

² novotelnova@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>

³ genabolkun@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3297-3395>

⁴ Bochkanov_fy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9258-2551>

⁵ karpenkov_d_y@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8686-2303>

Аннотация

Введение. При создании новых магнитоупорядоченных фаз материалов используются технологии твердотельного синтеза в реакционных тиглях. Конечный результат процесса синтеза в реакционных тиглях обусловлен технологическими факторами, режимом прохождения тока и его плотностью, достигаемой температурой в реакционной зоне, временем воздействия, геометрическими параметрами тигля и реакционной зоны и другими факторами. В работе приведены результаты исследования влияния степени заполнения реакционного объема тигля расплавом олова на процессы тепло- и массопереноса при его электротермической обработке. **Метод.** Предложена модель, описывающая диффузионные процессы в реакционной зоне в ходе синтеза интерметаллидов железа и олова при электротермическом воздействии. Исследование процесса диффузии в реакционных тиглях системы железо-олово выполнено методом конечных элементов в программной среде Comsol Multiphysics. **Основные результаты.** Показано, что снижение степени заполнения реакционного тигля компонентами синтеза приводит к изменению распределения плотности тока и понижению температуры в реакционной зоне, что влияет на процессы массопереноса. **Обсуждение.** Результаты работы могут быть использованы при анализе экспериментальных данных по получению интерметаллидов методом реакционного синтеза и определении необходимых технологических параметров для синтеза новых материалов.

Ключевые слова

компьютерное моделирование, метод конечных элементов, электродиффузия, теплоперенос, массоперенос

Ссылка для цитирования: Фомин В.Е., Новотельнова А.В., Болкунов Г.А., Бочканов Ф.Ю., Карпенков Д.Ю. Оценка влияния степени заполнения реакционного тигля железо-олово на процессы тепло- и массопереноса в присутствии электрического тока высокой плотности // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 5. С. 1065–1072. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-5-1065-1072

Study of heat and mass transfer processes in the Fe-Sn reaction crucible in the presence of high-density electric current

Vladislav E. Fomin¹✉, Anna V. Novotelnova², Gennady A. Bolkunov³, Fedor Yu. Bochkanov⁴, Dmitry Yu. Karpenkov⁵

^{1,2,3} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

^{4,5} National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, 119049, Russian Federation

⁵ Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russian Federation

¹ vladdislav.fomin@yandex.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-8970-0809>

² novotelnova@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>

³ genabolkun@gmail, <https://orcid.org/0000-0003-3297-3395>

⁴ Bochkanov_fy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9258-2551>

⁵ karpenkov_d_y@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8686-2303>

Abstract

In the search for new magnetically ordered phases of materials, solid-state synthesis technologies in reaction crucibles are used. The final result of the synthesis process in reaction crucibles is conditioned, in particular, by technological factors, the mode of current flow and its density, the achieved temperature in the reaction zone, exposure time, geometrical parameters of the crucible and the reaction zone, etc. The paper presents the results of influence investigation of the reaction volume filling degree with tin melt on the processes of heat and mass transfer during its electrothermal treatment. A model describing diffusion processes in the reaction zone during the synthesis of iron and tin intermetallics under electrothermal treatment has been proposed. The diffusion process in the reaction crucibles of the iron-tin system was investigated by the finite element method in the Comsol Multiphysics software environment. It is shown that the decrease in the degree of filling of the reaction crucible with synthesis components leads to a change in the distribution of current density and a decrease in the temperature in the reaction zone, which affects the mass transfer processes. The results of the work can be used in the analysis of experimental data on the production of intermetallics by reaction synthesis and determination of the necessary technological parameters for the synthesis of new materials.

Keywords

computer simulation, finite element method, electrodiffusion, heat transfer, mass transfer

For citation: Fomin V.E., Novotelnova A.V., Bolkunov G.A., Bochkanov F.Yu., Karpenkov D.Yu. Study of heat and mass transfer processes in the Fe-Sn reaction crucible in the presence of high-density electric current. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 5, pp. 1065–1072 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-5-1065-1072

Введение

В последние годы ведутся исследования по поиску новых метастабильных магнитоупорядоченных фаз и термоэлектрических материалов на основе многокомпонентных соединений, демонстрирующих высокие значения амплитуды поперечного аномального эффекта Нернста [1–5]. Одной из наиболее перспективных систем при поиске является система железо-олово (Fe-Sn) [3]. Существование новых метастабильных соединений в данной системе с уникальными функциональными свойствами было предсказано в работе [6]. Исходное сырье для синтеза этих материалов относительно недорого и доступно, что мотивирует на детальное изучение условий возникновения новых фаз и разработку технологий их получения.

При разработке фазовых диаграмм многокомпонентных смесей применяется методика реакционных тиглей [6]. Процесс фазообразования происходит в реакционной зоне тигля, выполненного из наиболее тугоплавкого компонента исследуемой системы (железо). Другой компонент реакции (олово), обладающий меньшей температурой плавления, помещается внутрь тигля. При нагреве тигля до температур, превышающих температуру плавления олова, происходит твердо-жидкофазная реакция с образованием интерметаллических соединений. Дополнительно ускорить процесс плавления и синтеза позволяет приложение электрического

тока высокой плотности [7–10]. Свойства полученных соединений могут существенно отличаться от соединений того же стехиометрического состава, полученных традиционными методами в равновесных условиях. Фазовая диаграмма системы железо-олово и способ ее получения описаны в [11].

Интенсивность электродиффузионных процессов зависит от плотности электрического тока и температуры. В реальном технологическом эксперименте можно лишь измерить параметры электрического нагружения и получить отклик о нагреве поверхности тигля. Однако экспериментально установить распределение плотности тока и поля температуры в объеме реакционного тигля невозможно, а значит невозможно определить условия получения новых фаз.

На локальное распределение температурных и электрических полей могут воздействовать технологические факторы и технические особенности проведения процесса. Оценить данное влияние на технологические и физические параметры необходимо для обеспечения воспроизводимости экспериментальных результатов и корректной оценки условий прохождения синтеза и анализа полученных результатов.

Оценка может быть произведена с использованием метода математического моделирования. Это позволит установить условия, при которых, при заданном электрическом нагружении, образовалась та или иная фаза в исследуемой области реакционной зоны. С другой

стороны, изменяя начальные условия, можно установить, как влияет тот или иной технологический фактор на процесс.

В настоящей работе на примере реакционного синтеза интерметаллидов системы железо-олово рассмотрено одно из условий влияния на тигель — степень заполнения реакционного тигля оловом на распределение тепловых и электрических полей и эффективность диффузионного процесса.

Описание технологического процесса синтеза в реакционном тигле

Синтез интерметаллидов системы Fe-Sn осуществлен в реакционном тигле цилиндрической формы, изготовленном из железа. Во внутреннюю цилиндрическую полость тигля помещено олово в твердом состоянии. Сверху тигель закрыт крышкой, выполненной из железа. Таким образом, внутри тигля образована закрытая реакционная зона. Заполнение тигля и установка образца выполнены при комнатной температуре.

Далее тигель помещен в вакуумную камеру между двумя графитовыми нагревателями. Вся система установлена между двумя вакуумными медными токовводами, имеющими защитные чехлы, выполненные из стали.

Под воздействием электрического напряжения, прикладываемого к стальным электродам, через графитовые пуансоны и заполненный реакционный тигель протекает электрический ток. Под действием электрического тока компоненты реакции были нагреты джоулевым теплом. При этом олово переходит в жидкое состояние и начинается взаимная диффузия компонентов (железа в олово и олова в железо). В таком состоянии происходит выдержка при заданных условиях в течение нескольких часов. После чего напряжение снимается, тигель остывает и производится анализ состава и свойств продуктов синтеза.

Компьютерное моделирование процесса реакционного синтеза интерметаллидов

Компьютерная модель создана в программной среде Comsol Multiphysics, выполняющей расчеты методом конечных элементов. Геометрические и физические данные модели и компонентов, принимающих участие в процессе, подобраны в соответствии с реальной установкой для проведения синтеза.

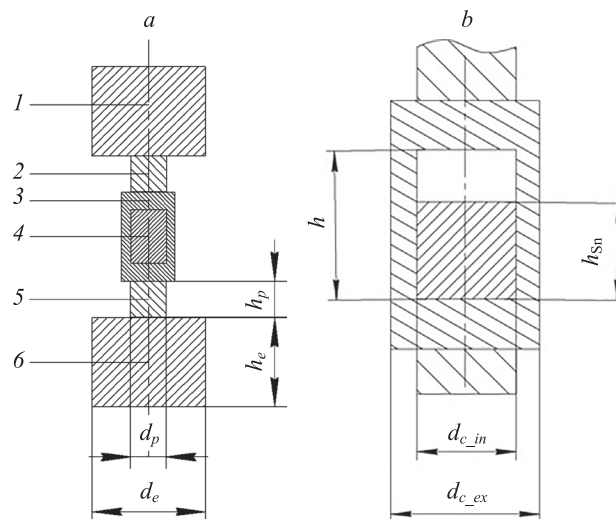


Рис. 1. Геометрическая модель установки для реакционного синтеза (а): 1, 6 — верхний и нижний стальные электроды ($d_e = 19,2$ мм, $h_e = 15$ мм); 2, 5 — пуансоны, выполненные из графита ($d_p = 6$ мм, $h_p = 6$ мм); 3 — реакционный тигель, выполненный из железа ($d_{c_ex} = 10$ мм, $d_{c_in} = 15$ мм); 4 — реакционная зона, заполненная оловом ($d_{c_in} = 6$ мм, $h_{c_in} = 9$ мм). Фрагмент геометрической модели с частичным заполнением реакционной зоны (b): h — высота внутреннего объема тигля; h_{Sn} — уровень олова внутри тигля

Fig. 1. Geometric model of the installation (a): 1, 6 — top and bottom steel electrodes ($d_e = 19.2$ mm, $h_e = 15$ mm); 2, 5 — punches made of graphite ($d_p = 6$ mm, $h_p = 6$ mm); 3 — reaction crucible made of iron ($d_{c_ex} = 10$ mm, $d_{c_in} = 15$ mm); 4 — reaction zone filled with tin ($d_{c_in} = 6$ mm, $h_{c_in} = 9$ mm). Fragment of the geometric model with partial filling of the reaction zone (b): h — height of the crucible internal volume, h_{Sn} — tin level inside the crucible

Геометрическая модель. Геометрическая модель установки с заполненным тиглем приведена на рис. 1, а. На рис. 1, b показан фрагмент модели с частичным заполнением тигля.

Материалы. Свойства материалов, использованных в модели, приведены в таблице.

Температурные зависимости теплопроводности и электрической проводимости использованных материалов описаны в работах [18–22].

При моделировании использовались данные [23, 24] о коэффициенте диффузии для железа и олова, а также их температурные зависимости.

Таблица. Свойства материалов, входящих в состав установки
Table. Properties of materials used in the installation

Свойство	Железо технически чистое	Олово химически чистое	Графит технически чистый	Сталь 3
Плотность ρ , кг/м ³	7850 [12]	7310 [12]	1870 [13]	7740 [14]
Удельная теплоемкость c , Дж/(кг·К)	449 [15]	230 [15]	714 [16]	4620 [14]
Температурный коэффициент линейного расширения $\alpha \cdot 10^{-6}$, 1/К	11,5 [12]	23,4 [12]	4 [17]	14 [14]
Модуль Юнга E_y , ГПа	212 [12]	48,3 [12]	10 [13]	200 [14]

Математическое описание модели. Для описания электрических процессов применен закон Ома:

$$\mathbf{J} = \sigma_e \mathbf{E},$$

где σ_e — удельная электрическая проводимость; \mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля; \mathbf{J} — вектор плотности тока.

Закон сохранения электрического заряда:

$$\operatorname{div} \mathbf{J} = 0.$$

Тепломассообменные процессы описаны с использованием:

— уравнения теплового баланса:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{q} = q_v,$$

где ρ — плотность; c_p — удельная изобарная теплоемкость; t — время; q_v — объемная плотность теплового потока от внутреннего теплового источника; \mathbf{q} — вектор плотности теплового потока; T — абсолютная температура;

— закона Фурье:

$$\mathbf{q} = -\lambda \operatorname{grad} T,$$

где λ — теплопроводность;

— закона сохранения массы с дополнительным слагаемым, учитывающим электромиграцию,

$$\mathbf{J}_d = -D(T, p) \operatorname{grad} c_i - z u F c_i \Delta \phi,$$

где \mathbf{J}_d — диффузионный поток; $D(T, p)$ — коэффициент диффузии, как функция от температуры и давления; c_i — молярная концентрация компонента; z — зарядовое число; u — подвижность ионов; F — константа Фарадея равная 96485,33 Кл/моль; $\Delta \phi$ — разность электрических потенциалов.

Закон Гука с учетом теплового расширения применен для описания механических процессов:

$$\sigma = E_Y \left(\frac{\Delta l}{l} + \alpha (T - T_0) \right),$$

где σ — нормальное напряжение в поперечном сечении; E_Y — модуль Юнга; $\frac{\Delta l}{l}$ — относительное удлинение; α — температурный коэффициент линейного расширения; T_0 — начальная температура.

Верификация модели осуществлена путем сравнения результатов моделирования с результатами реального процесса. Выполнено сравнение значения температуры на внешней поверхности тигля при получении условий стационарного режима. Подробно процесс верификации модели описан в работе [25].

Граничные условия. Начальная температура всех составляющих установки принята равной температуре окружающей среды $T_{amb} = 293$ К. Температуры верхней и нижней поверхностей металлических электродов среды с помощью системы водяного охлаждения также

поддерживались равными температуре окружающей среды.

Вклад конвективной составляющей теплообмена не был использован, а были учтены только потери теплоты за счет лучистого теплообмена. На боковой поверхности деталей установки применено граничное условие лучистого теплообмена, описанное законом Стефана–Больцмана:

$$-\mathbf{nq} = \varepsilon \sigma_{CB} (T_{amb}^4 - T^4),$$

где \mathbf{n} — нормаль к поверхности излучения; σ_{CB} — константа Стефана–Больцмана; ε — коэффициент черноты; T — температура поверхности тела.

Задание электрического нагружения осуществлено с помощью подачи к верхней границе верхнего электрода электрического потенциала ϕ равного 1,4 В. К нижнему торцу нижнего стального электрода применено граничное условие заземления, т. е. равенство электрического потенциала нулю.

Внешние боковые поверхности установки приняты электроизолированными.

Механическая фиксация применена к нижней поверхности. Все остальные поверхности могли смещаться свободно.

Основные результаты

Методами математического моделирования исследованы тепловые, электрические и диффузионные процессы в реакционной зоне в ходе электротермической обработки. Длительность обработки составила 8 и 24 ч. Выполнен анализ изменения распределения температуры и плотности тока в объеме реакционной зоны, а также концентрация компонентов в диффузионной зоне реакционных тиглей с различным уровнем заполнения.

Распределения тепловых и электрических полей в установившемся режиме в реакционной зоне при различных уровнях заполнения приведены на рис. 2.

Исследование изменения температуры на ранних стадиях процесса показало, что повышение температуры до стационарных значений происходит достаточно быстро — в течение десятков секунд. После определения теплового равновесия в системе существенных изменений в распределении температурного поля в течение электротермической обработки не произошло. Так, установившаяся температура при полностью заполненном тигле при электрическом нагружении 1,4 В достигла 1078 К. При снижении уровня заполнения тигля температура в реакционной зоне уменьшилась (рис. 2, *d, e, f*).

Профили распределения температуры и плотности тока в продольном и поперечном сечениях реакционной зоны приведены на рис. 3. Для поперечного сечения тигля расчет температуры и плотности тока произведен для сечения, выполненного на высоте 2 мм от дна тигля (рис. 3, *a, b*). Профили распределения температуры вдоль осевой линии представлены на рис. 3, *c*.

Изменение условий проведения синтеза вследствие понижения уровня заполнения влияет на интенсивности диффузионных процессов.

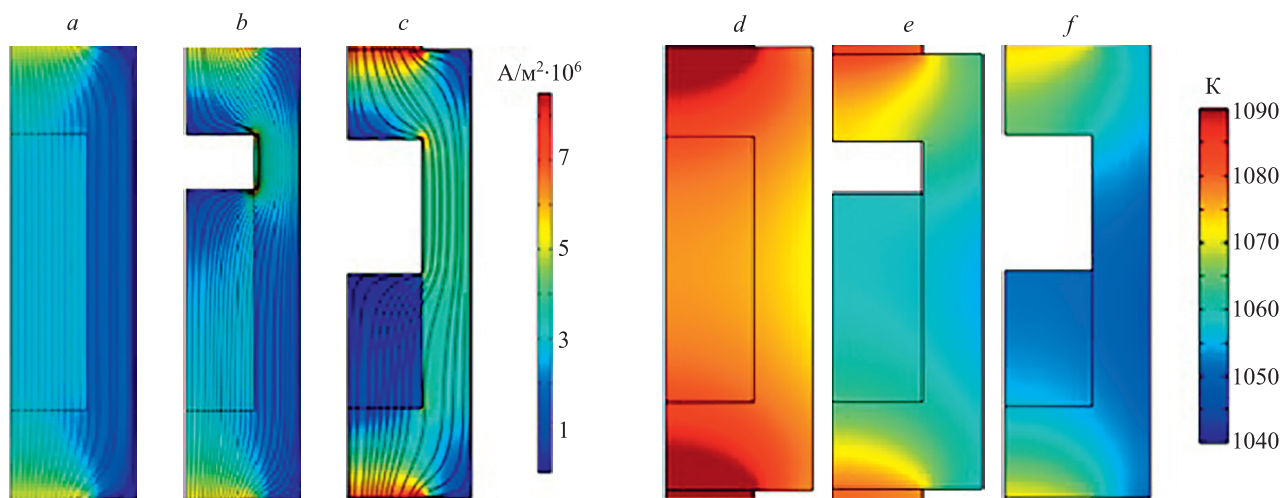


Рис. 2. Распределения плотности тока (a–c) и поля температуры (d–f) в реакционной зоне при различных уровнях заполнения тигля оловом:

$$h_{Sn} = h = 9 \text{ мм (a, d); } h_{Sn} = 0,8h = 7,2 \text{ мм (b, e); } h_{Sn} = 0,5h = 4,5 \text{ мм (c, f)}$$

Fig. 2. Current density distributions (a–c) and temperature fields (d–f) in the reaction zone at different levels of tin filling of the crucible:

$$h_{Sn} = h = 9 \text{ mm (a, d); } h_{Sn} = 0.8h = 7.2 \text{ mm (b, e); } h_{Sn} = 0.5h = 4.5 \text{ mm (c, f)}$$

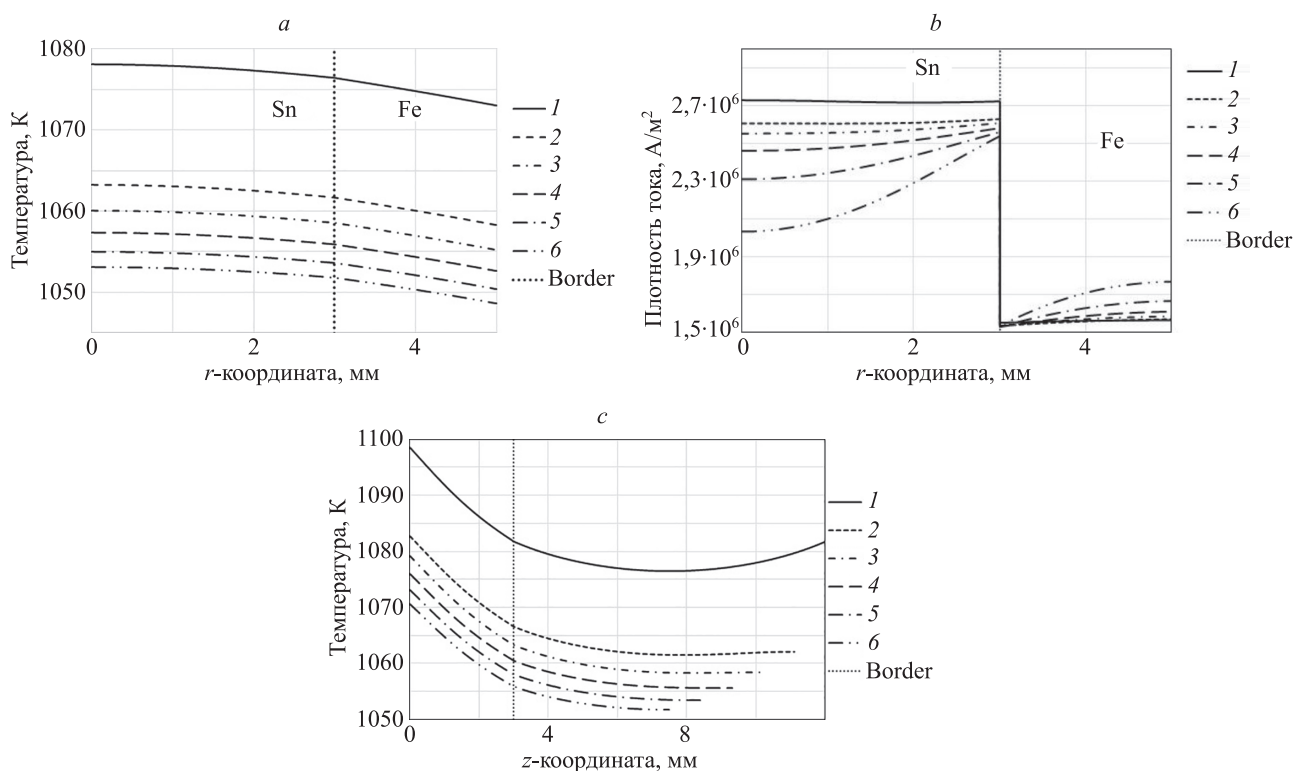


Рис. 3. Влияние уровня заполнения тигля на распределение плотности тока в поперечном сечении тигля (b) и температур (a, c) в поперечном (a) и продольном (c) сечениях реакционной зоны: 1 — $h_{Sn} = h = 9$ мм; 2 — $h_{Sn} = 0,9h = 8,1$ мм; 3 — $h_{Sn} = 0,8h = 7,2$ мм; 4 — $h_{Sn} = 0,7h = 6,3$ мм; 5 — $h_{Sn} = 0,6h = 5,4$ мм; 6 — $h_{Sn} = 0,5h = 4,5$ мм.

r -координата — радиальная координата/удаление от центра образца к краю тигля в радиальном направлении; z -координата — вертикальная координата/удаление от центра образца к краю тигля в вертикальном направлении. Border — граница раздела между оловом и железом

Fig. 3. Effect of crucible filling level on current density distribution in the cross section of the crucible (b) and temperature (a, c) in the cross section (a) and longitudinal (c) of the reaction zone: 1 — $h_{Sn} = h = 9$ mm; 2 — $h_{Sn} = 0.9h = 8.1$ mm; 3 — $h_{Sn} = 0.8h = 7.2$ mm; 4 — $h_{Sn} = 0.7h = 6.3$ mm; 5 — $h_{Sn} = 0.6h = 5.4$ mm; 6 — $h_{Sn} = 0.5h = 4.5$ mm.

r -coordinate — radial coordinate/distance from sample center to crucible edge in radial direction; z -coordinate — vertical coordinate/distance from sample center to crucible edge in vertical direction

Для оценки влияния уровня заполнения на диффузионные процессы выполнен расчет толщины эффективного диффузионного слоя d_{eff} (слоя, в котором массовая доля олова составляет не менее 40 %). Наиболее интересные для практического применения фазы интерметаллидов системы Fe-Sn могут формироваться при массовых концентрациях олова близких 40 %. Оценка d_{eff} произведена по расчетным профилям распределения концентраций олова и железа через заданное время: после 8 и 24 ч проведения электротермической обработки. Зависимости средней и максимальной температур и толщины диффузионного слоя от степени заполнения тигля показаны на рис. 4.

Характер зависимости изменения интенсивности диффузионных процессов (рис. 3) коррелирует с изменением температуры, вызванным снижением уровня заполнения тигля (рис. 4).

На поверхность расплава при частичном заполнении тигля из-за появления градиента концентрации олова происходит изменение поверхностного натяжения (эффект Марангони [26]). В результате этого в верхней

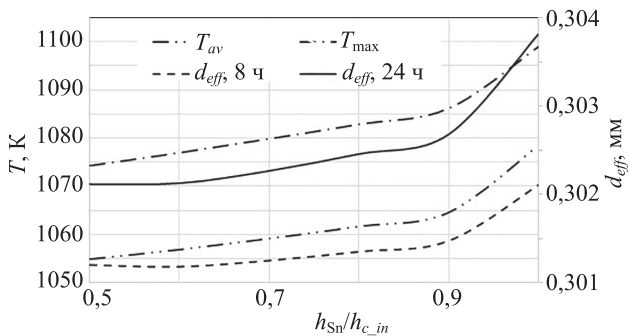


Рис. 4. Зависимости средней температуры, максимальной температуры и толщины диффузионного слоя после 8 и 24 часов от уровня заполнения

Fig. 4. Dependence of the average temperature, maximum temperature and thickness of the diffusion layer after 8 and after 24 hours on the filling level

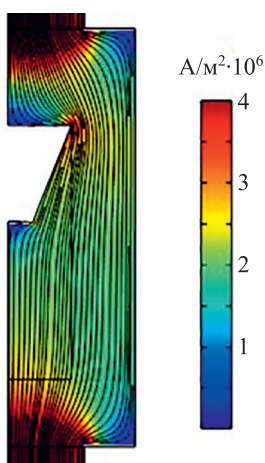


Рис. 5. Распределение плотности тока в реакционной зоне с учетом слоя оловы

Fig. 5. Current density distribution in the reaction zone taking into account the tin layer

зоне тигля, в незаполненной оловом области, появляется слой полуды на стенках тигля у поверхности олова. Условия проведения синтеза в этом случае будут существенно отличаться от условий, создаваемых в полностью заполненном тигле. Появление дополнительной площади соприкосновения между расплавленным оловом и железом приводит к перераспределению линий тока и его плотности в области контакта на рис. 5.

Образование слоя полуды ведет к изменению распределения плотности тока и снижению равновесной температуры. Так, появление слоя полуды в тигле, заполненном на 60 %, приводит к понижению температуры олова на 5 К, с 1060 К без слоя до 1055 К со слоем полуды, полностью покрывающем стенки тигля в его незаполненной части, при сохранении электрического нагружения.

Обсуждение результатов

Получено распределение тепловых и электрических полей в ходе высокотемпературной обработки тигля в присутствии электрического тока высокой плотности при разном уровне заполнения реакционной зоны. В случае полностью заполненного тигля распределение линий плотности тока и температурного поля после выхода в стационарный режим практически близко к равномерному. При этом максимальных значений температура достигает в центре заполненного тигля и снижается к приграничной области на 1–2 К.

Наибольшая температура обработки при сохранении электрической нагрузки 1,4 В получена при максимальном заполнении тигля. При уменьшении заполнения тигля до половины высоты наблюдается снижение температуры обработки на 25 К. Понижение температуры в тигле связано с перераспределением линий плотности тока. Плотность тока в центральной части частично заполненного тигля существенно (до 25 %) снижается.

В случае частичного заполнения наблюдаются локальные неоднородности распределения плотности тока в областях, прилегающих к незаполненной части тигля. Локальные неоднородности распределения плотности тока могут усиливаться при появлении слоя полуды на стенках тигля.

Степень заполнения тигля реагентом влияет и на интенсивность диффузионных процессов. Снижение активности диффузионных процессов в приграничной области тигля обусловлено снижением энергии атомов за счет уменьшения подвода джоулева тепла и уменьшением вклада от электродиффузии.

Таким образом, уровень заполнения тигля может существенным образом сказываться на конечном результате синтеза. Снижение плотности тока и температуры тигля, появление локальных неоднородностей их распределения могут приводить к изменению фазового состава продукта реакции.

Заключение

Методом математического моделирования на примере синтеза интерметаллидов системы железо-олово проанализировано влияние фактора уровня заполне-

ния реакционного тигля расплавом на условия проведения его электротермической обработки. Показано, что понижение уровня заполнения тигля оловом при фиксированном значении электрического нагружения сопровождается снижением температуры проведения процесса, уменьшением плотности тока до 25 % и появлением локальных областей неоднородностей.

Изменение концентрации олова в приповерхностных слоях расплава при неполном заполнении тигля вызывает появление градиента концентрации в верхних

слоях олова, что приводит к появлению слоя полуды на стенках тигля. Слой полуды, образующийся в результате действия сил поверхностного натяжения, уменьшает температуру в реакционной зоне на 4–6 К и способствует появлению дополнительных локальных неоднородностей распределения плотности тока.

Таким образом, показано, что фактор уровня заполнения объема реакционных тиглей компонентами синтеза необходимо учитывать при анализе результатов натуральных экспериментов по синтезу интерметаллидов.

Литература

1. Bell L.E. Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems // *Science*. 2008. V. 321. N 5895. P. 1457–1461. <https://doi.org/10.1126/science.1158899>
2. Miyasato T., Abe N., Fujii T., Asamitsu A., Onose Y., Onoda S., Nagaosa N., Tokura Y. Anomalous Hall effect and Nernst effect in itinerant ferromagnets // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2007. V. 310. N 2. P. 1053–1055. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2006.10.239>
3. Predel B. Fe-Sn (Iron-tin) // *Dy-Er-Fr-Mo*. 1995. P. 1–5. https://doi.org/10.1007/10474837_1342
4. Li H., Ding B., Chen J., Li Z., Liu E., Xi X., Wu G., Wang W. Large anisotropic topological Hall effect in a hexagonal non-collinear magnet Fe₅Sn₃ // *Applied Physics Letters*. 2020. V. 116. N 18. P. 182405. <https://doi.org/10.1063/5.0005493>
5. Булат Л.П., Нefeldова И.А. О нелинейных термоэлектрических явлениях // *Вестник Международной академии холода*. 2012. № 4. С. 54–56.
6. Fayyazi B., Skokov K.P., Faske T., Karpenkov D.Yu., Donner W., Gutfleisch O. Bulk combinatorial analysis for searching new rare-earth free permanent magnets: Reactive crucible melting applied to the Fe-Sn binary system // *Acta Materialia*. 2017. V. 141. P. 434–443. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.09.036>
7. Chen C.M., Chen S.W. Electromigration effect upon the Zn/Ni and Bi/Ni interfacial reactions // *Journal of Electronic Materials*. 2000. V. 29. N 10. P. 1222–1228. <https://doi.org/10.1007/s11664-000-0016-5>
8. Pierce D.G., Brusius P.G. Electromigration: A review // *Microelectronics Reliability*. 1997. V. 37. N 7. P. 1053–1072. [https://doi.org/10.1016/s0026-2714\(96\)00268-5](https://doi.org/10.1016/s0026-2714(96)00268-5)
9. Torres-Gómez N., Nava O., Argueta-Figueroa L., García-Contreras R., Baeza-Barrera A., Vilchis-Nestor A.R. Shape tuning of magnetite nanoparticles obtained by hydrothermal synthesis: effect of temperature // *Journal of Nanomaterials*. 2019. V. 2019. P. 1–15. <https://doi.org/10.1155/2019/7921273>
10. Pingale A.D., Belgamwar S.U., Rathore J.S. Synthesis and characterization of Cu-Ni/Gr nanocomposite coatings by electro-co-deposition method: effect of current density // *Bulletin of Materials Science*. 2020. V. 43. N 1. P. 1–9. <https://doi.org/10.1007/s12034-019-2031-x>
11. Tréheux D., Guiraldenq P. Etude des diagrammes d'équilibre binaires par la méthode des couples de diffusion. Application au système fer-étain // *Scripta Metallurgica*. 1974. V. 8. N 4. P. 363–366 (in French). [https://doi.org/10.1016/0036-9748\(74\)90139-2](https://doi.org/10.1016/0036-9748(74)90139-2)
12. Davis J.R. *Concise Metals Engineering Data Book*. ASM International, 1997. 257 p.
13. Malmstrom C., Keen R., Green L. Some mechanical properties of graphite at elevated temperatures // *Journal of Applied Physics*. 1951. V. 22. N 5. P. 593–600. <https://doi.org/10.1063/1.1700013>
14. Mills K.C., Su Y., Li Z., Brooks R.F. Equations for the calculation of the thermo-physical properties of stainless steel // *ISIJ International*. 2004. V. 44. N 10. P. 1661–1668. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.44.1661>
15. Phillips N.E. Low-temperature heat capacity of metals // *C R C Critical Reviews in Solid State Sciences*. 1971. V. 2. N 4. P. 467–553. <https://doi.org/10.1080/10408437108243546>
16. Picard S., Burns D.T., Roger P. Determination of the specific heat capacity of a graphite sample using absolute and differential methods // *Metrologia*. 2007. V. 44. N 5. P. 294–302. <https://doi.org/10.1088/0026-1394/44/5/005>

References

1. Bell L.E. Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems. *Science*, 2008, vol. 321, no. 5895, pp. 1457–1461. <https://doi.org/10.1126/science.1158899>
2. Miyasato T., Abe N., Fujii T., Asamitsu A., Onose Y., Onoda S., Nagaosa N., Tokura Y. Anomalous Hall effect and Nernst effect in itinerant ferromagnets. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2007, vol. 310, no. 2, pp. 1053–1055. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2006.10.239>
3. Predel B. Fe-Sn (Iron-tin). *Dy-Er-Fr-Mo*, 1995, pp. 1–5. https://doi.org/10.1007/10474837_1342
4. Li H., Ding B., Chen J., Li Z., Liu E., Xi X., Wu G., Wang W. Large anisotropic topological Hall effect in a hexagonal non-collinear magnet Fe₅Sn₃. *Applied Physics Letters*, 2020, vol. 116, no. 18, pp. 182405. <https://doi.org/10.1063/5.0005493>
5. Bulat L.P., Nefeldova I.A. Nonlinear thermoelectric phenomena. *Journal of International Academy of Refrigeration*, 2012, no. 4, pp. 54–56. (in Russian)
6. Fayyazi B., Skokov K.P., Faske T., Karpenkov D.Yu., Donner W., Gutfleisch O. Bulk combinatorial analysis for searching new rare-earth free permanent magnets: Reactive crucible melting applied to the Fe-Sn binary system. *Acta Materialia*, 2017, vol. 141, pp. 434–443. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.09.036>
7. Chen C.M., Chen S.W. Electromigration effect upon the Zn/Ni and Bi/Ni interfacial reactions. *Journal of Electronic Materials*, 2000, vol. 29, no. 10, pp. 1222–1228. <https://doi.org/10.1007/s11664-000-0016-5>
8. Pierce D.G., Brusius P.G. Electromigration: A review. *Microelectronics Reliability*, 1997, vol. 37, no. 7, pp. 1053–1072. [https://doi.org/10.1016/s0026-2714\(96\)00268-5](https://doi.org/10.1016/s0026-2714(96)00268-5)
9. Torres-Gómez N., Nava O., Argueta-Figueroa L., García-Contreras R., Baeza-Barrera A., Vilchis-Nestor A.R. Shape tuning of magnetite nanoparticles obtained by hydrothermal synthesis: effect of temperature. *Journal of Nanomaterials*, 2019, vol. 2019, pp. 1–15. <https://doi.org/10.1155/2019/7921273>
10. Pingale A.D., Belgamwar S.U., Rathore J.S. Synthesis and characterization of Cu-Ni/Gr nanocomposite coatings by electro-co-deposition method: effect of current density. *Bulletin of Materials Science*, 2020, vol. 43, no. 1, pp. 1–9. <https://doi.org/10.1007/s12034-019-2031-x>
11. Tréheux D., Guiraldenq P. Etude des diagrammes d'équilibre binaires par la méthode des couples de diffusion. Application au système fer-étain. *Scripta Metallurgica*, 1974, vol. 8, no. 4, pp. 363–366 (in French). [https://doi.org/10.1016/0036-9748\(74\)90139-2](https://doi.org/10.1016/0036-9748(74)90139-2)
12. Davis J.R. *Concise Metals Engineering Data Book*. ASM International, 1997, 257 p.
13. Malmstrom C., Keen R., Green L. Some mechanical properties of graphite at elevated temperatures. *Journal of Applied Physics*, 1951, vol. 22, no. 5, pp. 593–600. <https://doi.org/10.1063/1.1700013>
14. Mills K.C., Su Y., Li Z., Brooks R.F. Equations for the calculation of the thermo-physical properties of stainless steel. *ISIJ International*, 2004, vol. 44, no. 10, pp. 1661–1668. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.44.1661>
15. Phillips N.E. Low-temperature heat capacity of metals. *C R C Critical Reviews in Solid State Sciences*, 1971, vol. 2, no. 4, pp. 467–553. <https://doi.org/10.1080/10408437108243546>
16. Picard S., Burns D.T., Roger P. Determination of the specific heat capacity of a graphite sample using absolute and differential methods. *Metrologia*, 2007, vol. 44, no. 5, pp. 294–302. <https://doi.org/10.1088/0026-1394/44/5/005>

17. Tsang D.K.L., Marsden B.J., Fok S.L., Hall G. Graphite thermal expansion relationship for different temperature ranges // *Carbon*. 2005. V. 43. N 14. P. 2902–2906. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2005.06.009>
18. Iwashita N., Imagawa H., Nishiumi W. Variation of temperature dependence of electrical resistivity with crystal structure of artificial graphite products // *Carbon*. 2013. V. 61. P. 602–608. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.05.042>
19. Klemens P.G., Pedraza D.F. Thermal conductivity of graphite in the basal plane // *Carbon*. 1994. V. 32. N 4. P. 735–741. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(94\)90096-5](https://doi.org/10.1016/0008-6223(94)90096-5)
20. Patel A.B., Bhatt N.K., Thakore B.Y., Vyas P.R., Jani A.R. The temperature-dependent electrical transport properties of liquid Sn using pseudopotential theory // *Molecular Physics*. 2014. V. 112. N 15. P. 2000–2004. <https://doi.org/10.1080/00268976.2013.877169>
21. Eiling A., Schilling J.S. Pressure and temperature dependence of electrical resistivity of Pb and Sn from 1-300K and 0-10 GPa-use as continuous resistive pressure monitor accurate over wide temperature range; superconductivity under pressure in Pb, Sn and In // *Journal of Physics F: Metal Physics*. 1981. V. 11. N 3. P. 623–639. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/11/3/010>
22. Taylor G.R., Isin A., Coleman R.V. Resistivity of iron as a function of temperature and magnetization // *Physical Review*. 1968. V. 165. N 2. P. 621–631. <https://doi.org/10.1103/physrev.165.621>
23. Torres D.N., Perez R.A., Dyment F. Diffusion of tin in α -iron // *Acta Materialia*. 2000. V. 48. N 11. P. 2925–2931. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(00\)00074-4](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(00)00074-4)
24. Neumann G., Tuijn C. *Self-diffusion and Impurity Diffusion in Pure Metals: Handbook of Experimental Data*. Elsevier, 2009. 360 p.
25. Фомин В.Е., Тукмакова А.С., Болкунов Г.А., Новотельнова А.В., Бочканов Ф.Ю., Карпенков Д.Ю. Моделирование диффузионных процессов при электротермической обработке реакционных тиглей системы железо-олово // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23. № 1. С. 202–209. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-202-209>
26. Дородницын В.А., Еленин Г.Г. Симметрия нелинейных явлений // Компьютеры и нелинейные явления. Информатика и современное естествознание. М.: Наука, 1988. С. 180.
17. Tsang D.K.L., Marsden B.J., Fok S.L., Hall G. Graphite thermal expansion relationship for different temperature ranges. *Carbon*, 2005, vol. 43, no. 14, pp. 2902–2906. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2005.06.009>
18. Iwashita N., Imagawa H., Nishiumi W. Variation of temperature dependence of electrical resistivity with crystal structure of artificial graphite products. *Carbon*, 2013, vol. 61, pp. 602–608. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.05.042>
19. Klemens P.G., Pedraza D.F. Thermal conductivity of graphite in the basal plane. *Carbon*, 1994, vol. 32, no. 4, pp. 735–741. [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(94\)90096-5](https://doi.org/10.1016/0008-6223(94)90096-5)
20. Patel A.B., Bhatt N.K., Thakore B.Y., Vyas P.R., Jani A.R. The temperature-dependent electrical transport properties of liquid Sn using pseudopotential theory. *Molecular Physics*, 2014, vol. 112, no. 15, pp. 2000–2004. <https://doi.org/10.1080/00268976.2013.877169>
21. Eiling A., Schilling J.S. Pressure and temperature dependence of electrical resistivity of Pb and Sn from 1-300K and 0-10 GPa-use as continuous resistive pressure monitor accurate over wide temperature range; superconductivity under pressure in Pb, Sn and In. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1981, vol. 11, no. 3, pp. 623–639. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/11/3/010>
22. Taylor G.R., Isin A., Coleman R.V. Resistivity of iron as a function of temperature and magnetization. *Physical Review*, 1968, vol. 165, no. 2, pp. 621–631. <https://doi.org/10.1103/physrev.165.621>
23. Torres D.N., Perez R.A., Dyment F. Diffusion of tin in α -iron. *Acta Materialia*, 2000, vol. 48, no. 11, pp. 2925–2931. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(00\)00074-4](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(00)00074-4)
24. Neumann G., Tuijn C. *Self-diffusion and Impurity Diffusion in Pure Metals: Handbook of Experimental Data*. Elsevier, 2009, 360 p.
25. Fomin V.E., Tukmakova A.S., Bolkunov G.A., Novotelnova A.V., Bochkhanov F.Yu., Karpenkov D.YU. Simulation of diffusion processes during electrothermal treatment of reaction crucibles of the Fe-Sn system. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 1, pp. 202–209. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-202-209>
26. Dorodnitsyn V.A., Elenin G.G. Symmetry of nonlinear phenomena. Computers and nonlinear phenomena. *Informatics and modern natural science*, Moscow, Nauka Publ., 1988, pp. 180. (in Russian)

Авторы

Фомин Владислав Евгеньевич — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57202281009](https://orcid.org/0000-0002-8970-0809), <https://orcid.org/0000-0002-8970-0809>, vladdis Slav.fomin@yandex.ru

Новотельнова Анна Владимировна — кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 56436689700](https://orcid.org/0000-0003-0073-2415), <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>, novotelnova@yandex.ru

Болкунов Геннадий Александрович — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 56436689700](https://orcid.org/0000-0003-3297-3395), <https://orcid.org/0000-0003-3297-3395>, genabolkun@gmail.com

Бочканов Федор Юрьевич — младший научный сотрудник, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, 119049, Российская Федерация, [sc 36918372200](https://orcid.org/0000-0001-9258-2551), <https://orcid.org/0000-0001-9258-2551>, Bochkanov_fy@mail.ru

Карпенков Дмитрий Юрьевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, 119049, Российская Федерация; старший научный сотрудник, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Российская Федерация, [sc 36918372200](https://orcid.org/0000-0001-8686-2303), <https://orcid.org/0000-0001-8686-2303>, karpnkov_d_y@mail.ru

Статья поступила в редакцию 16.05.2023
 Одобрена после рецензирования 31.08.2023
 Принята к печати 30.09.2023

Authors

Vladislav E. Fomin — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57202281009](https://orcid.org/0000-0002-8970-0809), <https://orcid.org/0000-0002-8970-0809>, vladdis Slav.fomin@yandex.ru

Anna V. Novotelnova — PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 56436689700](https://orcid.org/0000-0003-0073-2415), <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>, novotelnova@yandex.ru

Gennady A. Bolkunov — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 56436689700](https://orcid.org/0000-0003-3297-3395), <https://orcid.org/0000-0003-3297-3395>, genabolkun@gmail.com

Fedor Yu. Bochkhanov — Junior Researcher, National University of Science and Technology MISIS, Moscow, 119049, Russian Federation, [sc 36918372200](https://orcid.org/0000-0001-9258-2551), <https://orcid.org/0000-0001-9258-2551>, Bochkanov_fy@mail.ru

Dmitry Yu. Karpenkov — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, National University of Science and Technology MISIS, Moscow, 119049, Russian Federation; Senior Researcher, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russian Federation, [sc 36918372200](https://orcid.org/0000-0001-8686-2303), <https://orcid.org/0000-0001-8686-2303>, karpnkov_d_y@mail.ru

Received 16.05.2023
 Approved after reviewing 31.08.2023
 Accepted 30.09.2023



Работа доступна по лицензии
 Creative Commons
 «Attribution-NonCommercial»