

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-1-202-209

УДК 536.4

Моделирование диффузионных процессов при электротермической обработке реакционных тиглей системы железо–олово

Владислав Евгеньевич Фомин¹✉, Анастасия Сергеевна Тукмакова²,
Геннадий Александрович Болкунов³, Анна Владимировна Новотельнова⁴,
Федор Юрьевич Бочканов⁵, Дмитрий Юрьевич Карпенков⁶

^{1,2,3,4} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

^{5,6} Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, 119049, Российская Федерация

⁶ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Российская Федерация

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

² astukmakova@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>

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

⁴ novotelnova@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>

⁵ Bochkanov_fy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9258-2551>

⁶ karpenkov_d_y@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8686-2303>

Аннотация

Предмет исследования. Методами численного моделирования исследована закономерность диффузионных процессов в реакционных тиглях системы железо–олово при их электротермической обработке. Изучено влияние плотности тока и температуры на процессы тепло- и массопереноса в реакционной зоне. **Метод.** Численное моделирование выполнено методом конечных элементов. Разработанная модель описывает механические, тепловые, электрические и химические процессы при электротермической обработке системы железо–олово в реакционном тигле с учетом распределения компонентов при различных условиях обработки реакционного тигля. **Основные результаты.** Выполнен сравнительный анализ расчетных данных по диффузии олова в железо в условиях длительного воздействия высоких температур без приложения электрического напряжения и при нагреве реакционной зоны за счет пропускания электрического тока высокой плотности. Получена картина распределения массовых долей компонентов в зависимости от вида воздействия. Определена глубина проникновения взаимодействующих компонентов и выполнена оценка интенсивности протекания массообменных процессов. Установлены закономерности тепломассопереноса в системе железо–олово при изменении начальных параметров процесса. Верификация модели проведена путем сопоставления результатов моделирования с данными натурных экспериментов на контрольных образцах. **Практическая значимость.** Результаты исследований могут быть использованы при прогнозировании условий получения новых функциональных материалов.

Ключевые слова

компьютерное моделирование, теплопроводность, электропроводность, диффузия, тепловые и электрические поля

Ссылка для цитирования: 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. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-1-202-209

Simulation of diffusion processes during electrothermal treatment of reaction crucibles of the Fe-Sn system

Vladislav E. Fomin¹✉, Anastasiia S. Tukmakova², Gennady A. Bolkunov³,
Anna V. Novotelnova⁴, Fedor Yu. Bochkanov⁵, Dmitry Yu. Karpenkov⁶

^{1,2,3,4} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

^{5,6} National University of Science and Technology MISIS, Moscow, 119049, Russian Federation

⁶ Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russian Federation

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

² astukmakova@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>

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

⁴ novotelnova@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0073-2415>

⁵ Bochkanov_fy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9258-2551>

⁶ karpenkov_d_y@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8686-2303>

Abstract

The diffusion processes regularity in the reaction crucibles of the iron-tin system during their electrothermal treatment was studied by the numerical simulation methods. The effect of current density and temperature on the processes of heat and mass transfer in the reaction zone has been studied. Numerical simulation was performed by the finite element method. The developed model includes mechanical, thermal, electrical and chemical processes during the electrothermal treatment of the iron-tin system in the reaction crucible, taking into account the distribution of components under various processing conditions of the reaction crucible. A comparative analysis of the calculated data on the diffusion of tin into iron under conditions of long-term exposure to high temperatures without the application of an electric voltage and when the reaction zone is heated by passing a high-density electric current is performed. A picture of the distribution of mass fractions of components depending on the type of impact is obtained. The penetration depth of the interacting components was determined and the intensity of the mass transfer processes was assessed. The regularities of heat and mass transfer in the system of iron and tin with a change of the process initial parameters are established. The model was verified by comparing the simulation results with the data of full-scale experiments on control samples. The research results can be used to predict the conditions for obtaining new functional materials.

Keywords

computer simulation, thermal conductivity, electrical conductivity, diffusion, thermal and electric fields

For citation: Fomin V.E., Tukmakova A.S., Bolkunov G.A., Novotelnova A.V., Bochkanov 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). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-1-202-209

Введение

В настоящее время ведется поиск новых материалов для твердотельных преобразователей электрической энергии и технических решений, основанных на альтернативных эффектах (например, аномальные термомагнитные эффекты, нелинейные термоэлектрические явления) [1, 2].

Возникновение исследовательского интереса к этой системе обусловлено обнаружением у ряда соединений высоких значений аномальных эффектов Холла и Нернста, а также наличием фаз, перспективных для использования в качестве постоянных магнитов [3].

Система железо–олово имеет большое количество интерметаллических соединений перспективных для использования, как в качестве термоэлектрических материалов, так и для изготовления магнитотвердых материалов [4].

Поиск новых фаз и разработка технологий их получения может привести к получению высокоэффективных магнитных устройств и преобразователей энергии, использующих в своей работе поперечный термомагнитный эффект Нернста.

Для эффективного поиска метастабильных фаз со структурой и свойствами, отличающимися от полученных традиционными методами сплавления компонентов, применяются методы комбинаторного ана-

лиза систем. Подвод тепла к реакционной зоне может быть организован различными методами, такими как инициирование реакции горения при самораспространяющемся высокотемпературном синтезе или прямым нагревом реакционной зоны электрическим током [5, 6].

В поисковых исследованиях одним из методов получения новых фаз является техника реакционных тиглей [7]. Процесс осуществляется путем пропуска электрического тока через находящийся в замкнутой форме образец [8]. В ходе электротермической обработки температура реакционной зоны достигает значений, при которых содержимое тигля переходит в жидкое состояние. При этом материал, из которого изготовлен тигель, остается в твердом состоянии. На границе между расплавом и телом тигля происходит твердо-жидкофазная реакция. Полученный градиент концентрации ускоряет формирование соединений [9]. Данный процесс может быть модифицирован путем применения электрического тока высокой плотности. При этом фазообразование в диффузионной зоне тигля сопровождается такими эффектами как тепловое расширение, диффузионные процессы (концентрационная диффузия, бародиффузия, термодиффузия и электродиффузия ионов) [10, 11]. Условия, при которых проходит обработка, в этом случае отличны от условий формирования фаз путем сплавления реагентов в заданной пропорции.

Температура обработки — один из важнейших параметров, оказывающих влияние на формирование фаз. Значение температуры в реакционной зоне зависит от условий электрического нагружения. Требуемые значения разности потенциалов, а также значения получаемых температур и данные по массообмену могут быть получены путем математического моделирования.

Цель данной работы — изучение процессов массопереноса в объеме реакционной установки при обработках системы прямым нагревом и электрическим током высокой плотности.

Моделирование процесса

Геометрия модели. Установка для проведения синтеза (рис. 1) представляет собой вакуумную камеру со стальными стенками. Внутри камеры между стальными электродами 1, 6 (рис. 1) размещен закрепленный графитовыми вставками реакционный тигель 3 цилиндрической формы. Тигель заполнен компонентами исследуемой фазовой диаграммы (образец, выполненный из олова 4). Отвод тепла от камеры происходит с помощью водяного охлаждения.

Метод и материалы. Процесс моделирования произведен в реакционном тигле, выполненном из же-

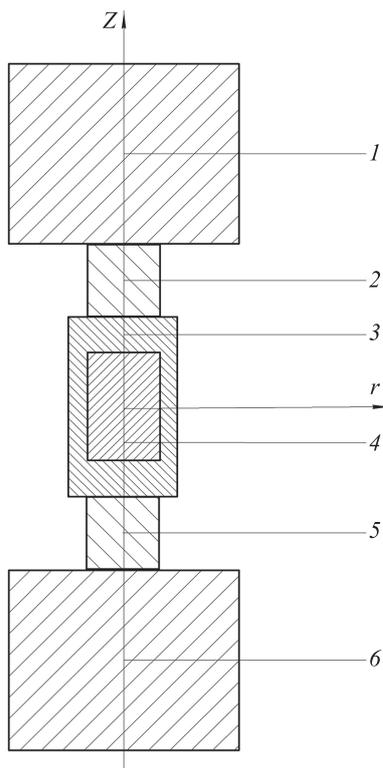


Рис. 1. Геометрическая модель установки: 1, 6 — верхний и нижний стальные электроды; 2 — графитовый пуансон; 3 — реакционный тигель; 4 — реакционная зона, заполненная оловом; 5 — пуансоны, выполненные из графита; Z — вертикальная ось; r — горизонтальная ось

Fig. 1. Geometrical model of the installation: 1, 6 — upper and lower steel electrodes; 2 — punch, made of graphite; 3 — reaction crucible; 4 — reaction zone filled with tin; 5 — punches made of graphite; Z — vertical axis; r — horizontal axis

леза. В тигель помещено олово в твердом состоянии. Электрическое нагружение осуществляется путем подачи электрического напряжения между верхним и нижним электродами. Под воздействием приложенного электрического напряжения через реакционный тигель протекает электрический ток. За счет выделения джоулева тепла происходит нагрев тигля и плавление олова. Этот процесс сопровождается интердиффузией железа и олова. Диффузионный процесс стимулируется тепловым воздействием, однако немалую роль в процессе играет электромиграция ионов [12].

Свойства материалов, используемых в процессе, приведены в табл. 1.

Для описания температурных зависимостей коэффициентов тепло- и электропроводности использованы данные [13–19]. Значения коэффициентов диффузии железа и олова, и температурные зависимости взяты из работ [20, 21].

Математическая модель процесса

Определим следующие переменные: поле температуры, плотность тока и концентрацию компонентов. Получим уравнения, использованные для описания физических процессов при реакционном синтезе.

Для описания электрических процессов применим закон Ома:

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

где σ_e — коэффициент электропроводности; \mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля; \mathbf{J} — вектор плотности тока.

Закон сохранения электрического заряда:

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

Для описания тепломассообменных процессов используем:

— уравнение теплового баланса:

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

где ρ — плотность; C_p — удельная изобарная теплоемкость; t — время; Q — источник джоулева тепла; T — абсолютная температура; \mathbf{q} — вектор плотности теплового потока;

— закон Фурье:

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T,$$

где κ — коэффициент теплопроводности;

— закон сохранения массы для описания диффузионных процессов, последнее слагаемое которого учитывает электромиграцию ионов:

$$\mathbf{J}_d = -D(T, p) \nabla c - z u F c,$$

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

Таблица 1. Свойства материалов, входящих в состав установки
 Table 1. Properties of materials used in the installation

Свойство	Материал			
	Железо	Олово	Графит	Сталь
Плотность ρ , кг/м ³	7850 [11]	7310 [11]	1870 [12]	7740 [14]
Удельная изобарная теплоемкость C_p , Дж/(кг·К)	449 [13]	230 [13]	714 [15]	4620 [14]
Коэффициент теплового расширения $\alpha \cdot 10^{-6}$, 1/К	11,5 [11]	23,4 [11]	4 [16]	14 [14]
Модуль Юнга E_Y , ГПа	212 [11]	48,3 [11]	10 [12]	200 [14]

Для описания механических процессов с учетом теплового расширения применим закон Гука:

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

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

Граничные условия тепловых процессов

Примем, что начальная температура T_0 всех элементов установки равна температуре окружающей среды $T_{amb} = 293$ К. Во время проведения процесса синтеза система водяного охлаждения поддерживает температуру верхней поверхности верхнего электрода и нижней поверхности нижнего электрода, равную температуре окружающей среды.

На боковой поверхности деталей установки применено граничное условие лучистого теплообмена, описываемое законом Стефана–Больцмана:

$$-\mathbf{nq} = \varepsilon \sigma_{CB} (T_{amb}^4 - T_1^4),$$

где σ_{CB} — константа Стефана–Больцмана; ε — коэффициент черноты; T_{amb} — температура окружающей среды; T_1 — температура поверхности тела; \mathbf{n} — вектор нормали к поверхности.

Значение электрического потенциала ϕ_1 торца нижнего электрода принято равным нулю. Для создания электрического нагружения к верхней границе верхнего электрода необходимо приложить электрический потенциал ϕ_2 . Электрическое напряжение на установке, действующее в процессе синтеза, равно $U = \phi_2 - \phi_1$. Внешние боковые поверхности установки электроизолированы.

При задании граничных условий механических процессов принято, что нижняя поверхность установки механически жестко зафиксирована. К торцу верхнего электрода приложено давление 1 МПа. Все остальные поверхности могут смещаться свободно.

В качестве граничных условий при описании диффузионных процессов известно, что содержание железа перед началом процесса в тигле составило 100 %, а внутренний объем тигля полностью заполнен оловом, не содержащим примесей.

Основные результаты моделирования

Исследован процесс электропереноса в установке с геометрическими характеристиками (табл. 2).

Рассмотрен диффузионный процесс в двух режимах: под воздействием тепла без приложения электрического напряжения и в условиях нагрева реакционной зоны джоулевым теплом.

В первом случае при заданной температуре разность потенциалов между верхним и нижним электродами равнялась нулю. Температура всех деталей установки — 1073 К. Данное значение — температура проведения основных натуральных экспериментов с целью получения перспективных материалов [6].

Во втором случае к верхнему электроду приложен электрический потенциал, при этом нижний электрод заземлен. Электрический ток, полученный под действием электрического напряжения U , выполнил нагрев всех деталей установки до определенной температуры. Для выявления влияния напряжения на распределение температуры и массообменные процессы использованы значения U равные 0,3; 0,7; 1; 1,4 В.

Под действием электрического тока, протекающего через детали установки, происходит разогрев реакционной зоны джоулевым теплом. При этом процессы диффузии значительно ускоряются за счет вклада от электромиграции.

Разогрев реакционной зоны происходит за первые минуты (рис. 2). Далее температура реакционной зоны стабилизируется и поддерживается практически постоянной. Это связано с формированием теплового равновесия между джоулевым нагревом и охлаждением путем теплопередачи и излучения.

Средние значения плотности тока в радиальном сечении и достигаемая температура при приложении различных напряжений приведены в табл. 3.

Таблица 2. Геометрические характеристики модели
 Table 2. Geometry of the model

Элементы модели	d , мм	h , мм
Верхний и нижний стальные электроды	19,2	15,0
Графитовые пуансоны	6,0	6,0
Реакционный тигель	10,0	15,0
Внутренний объем тигля, заполненный оловом	6,0	9,0

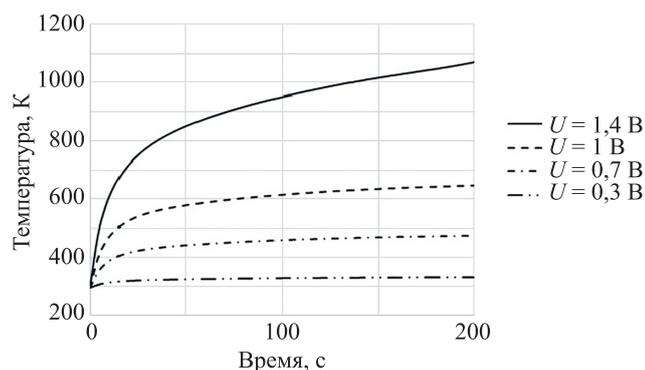


Рис. 2. Изменение средней температуры реакционной зоны от времени при различных значениях напряжения

Fig. 2. Change in the average temperature of the reaction zone versus time at various voltage values

Таблица 3. Значения плотности тока при заданных значениях разности потенциалов

Table 3. Values of current density for given values of potential difference

$U, \text{ В}$	Плотность тока $J, \text{ МА/м}^2$	$T, \text{ К}$
0,3	0,6	330
0,7	1,2	469
1	1,5	632
1,4	2,7	1073

Выполним формирование диффузионного слоя при воздействии электрического тока при напряжении 1,4 В, так как в этом случае в реакционной зоне достигается необходимая температура $T = 1073 \text{ К}$.

Проведем анализ изменения концентрации олова в железном тигле при различных условиях синтеза. Рассчитаем изменения эффективной толщины диффузионного слоя в тигле d_{eff} (слоя с содержанием олова

40 %) от длительности процесса. Получим, что эффективность диффузии повышается при воздействии электрического напряжения (рис. 3). Рассчитанное по закону Фика значение d_{eff} увеличивается со временем процесса (рис. 3, а). Изменение массовой доли олова в приграничных слоях вблизи границы раздела железо–олово (Fe–Sn) показано на рис. 3, б. Значение $L = 0$ соответствует положению границы раздела.

Верификация модели

Верификация модели осуществлена путем сопоставления данных моделирования и натуральных экспериментов, проведенных на контрольных образцах. В ходе экспериментов выполнен синтез образцов в течение фиксированных промежутков времени — 3, 24, 120 ч. После окончания каждого из экспериментов, полученный контрольный образец был разрезан и проведен анализ содержимого методами сканирующей электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии. Данные по глубине диффузии олова в железо сопоставлялись с концентрационными профилями, полученными при моделировании с аналогичными условиями.

Отметим, что при реакции в объеме реакционного тигля происходят несколько процессов: интердиффузия компонентов тигля на границе расплава и стенок тигля, а также растворение стенок тигля в расплаве.

Скорость растворения материала тигля определена экспериментально. После завершения процесса обработки изучены образцы с помощью микроскопа и проведены измерения расстояния сдвига границы. Процедуры измерения произведены несколько раз после обработок температурой и током. Таким образом, была измерена скорость растворения материала тигля в олове (рис. 4).

Скорость растворения материала тигля непостоянна и значительно увеличивается при воздействии электрического напряжения. Отмечена неравномерность ско-

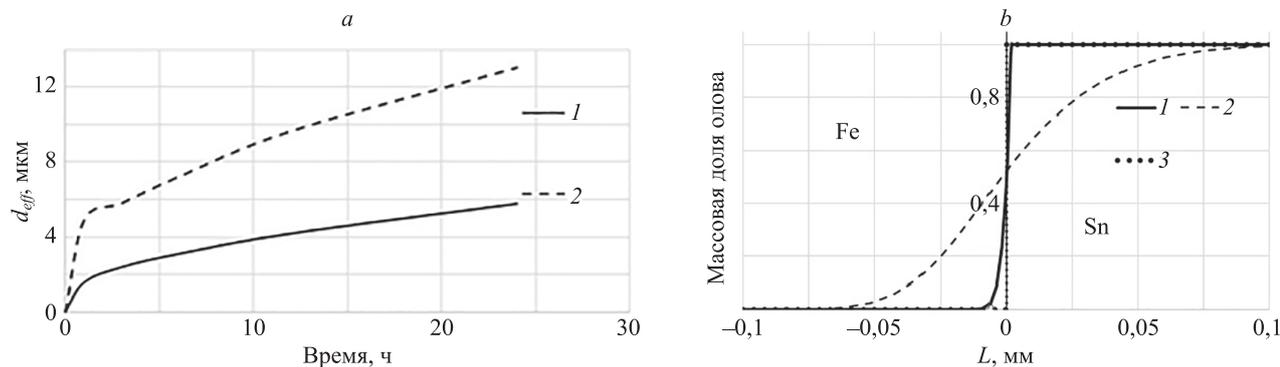


Рис. 3. Изменение эффективной толщины диффузионного слоя d_{eff} в тигле (а) и массовой доли олова в приграничных слоях вблизи нижней границы реакционной зоны у дна тигля от длительности процесса (б) при различных условиях: при высокой температуре без приложения электрического напряжения $U = 0 \text{ В}$ (кривая 1); при нагреве реакционной зоны электрическим током ($U = 1,4 \text{ В}$) (кривая 2); распределение компонентов в начале процесса (кривая 3). Температура $T = 1073 \text{ К}$

Fig. 3. Change in the effective thickness of the diffusion layer d_{eff} in the crucible (а) and the change in the tin mass fraction in the boundary layers near the lower boundary of the reaction zone at the bottom of the crucible vs the duration of the process (б) under different conditions: at high temperature without application of electric voltage $U = 0 \text{ V}$ (curve 1); when heating the reaction zone with electric current ($U = 1.4 \text{ V}$) (curve 2); distribution of components at the beginning of the process (curve 3). Temperature $T = 1073 \text{ К}$

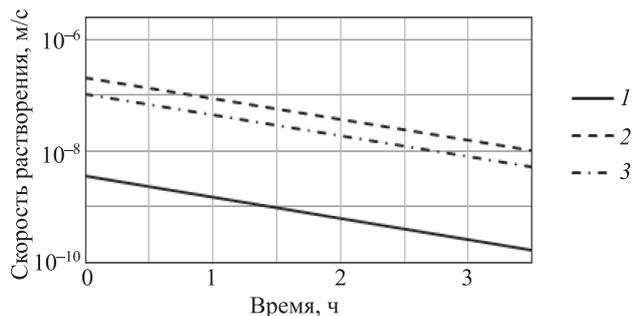


Рис. 4. Изменение скорости растворения материала тигля в ходе процесса синтеза при различных условиях проведения синтеза: при высокой температуре без приложения электрического напряжения ($U = 0$ В) (кривая 1); при нагреве реакционной зоны электрическим током ($U = 1,4$ В) у дна и боковой стенки тигля (кривые 2 и 3). Температура $T = 1073$ К

Fig. 4. Change in the dissolution rate of the crucible material during the synthesis process under various synthesis conditions: at high temperature without applying electrical voltage ($U = 0$ V) (curve 1); when heating the reaction zone with electric current ($U = 1.4$ V) at the bottom and side wall of the crucible (curves 2 and 3). Temperature $T = 1073$ K

рости растворения железа в объеме реакционной зоны. Так, скорость растворения дна тигля при напряжении 1,4 В примерно в два раза выше скорости растворения боковой стенки при том же напряжении. Это говорит о направленности массообменных процессов и показывает, что растворение и диффузия дна проходят более интенсивно, чем у стенок.

Сравнение результатов эксперимента и моделирования представлены в табл. 4.

Сопоставление результатов данных сканирующей электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии с данными моделирования позволило удостовериться в обоснованности полученных результатов. Расхождение в оценках глубины проникновения олова в железо натуральных и модельных экспериментов не превышали 4 %.

Обсуждение результатов

Условия проведения обработки и способ разогрева реакционной зоны влияют на скорость диффузионных процессов. При проведении процесса без воздействия

электрического напряжения происходит процесс диффузии железа в расплавленное олово и твердотельная диффузия олова в приграничные слои железа.

Толщина эффективного диффузионного слоя медленно увеличивается со временем, при этом скорость ее роста постепенно уменьшается. После 24 ч процесса значение эффективной толщины диффузионного слоя при синтезе в условиях воздействия высокой температуры без пропуска электрического тока достигает 6 мкм.

Толщина диффузионного слоя, получаемая при проведении экспериментов с нагревом реакционной зоны джоулевым теплом, увеличивается по сравнению со значением, полученным в ходе эксперимента при нагреве без приложения напряжения. Процесс в этом случае сопровождается увеличением толщины эффективного диффузионного слоя и повышением скорости растворения железа в олове. При воздействии электрическим током, величина d_{eff} повысилась до 13 мкм.

Наиболее интенсивно изменение массовой доли олова происходит вблизи границы реакционной зоны. Массовая доля олова внутри тигля постепенно убывает, в то же время происходит диффузия олова в приграничные слои железа и растворение приграничных слоев железа в олове. Изменение наклона кривой (рис. 2, б) в случае нагрева зоны электрическим током говорит об увеличении скорости массообменных процессов и ускорении диффузионных процессов, вызванных влиянием электропереноса/электродиффузии.

Данные, полученные методом математического моделирования, коррелируют с результатами натуральных экспериментов для образцов, синтезированных в аналогичных условиях. Уменьшение скорости роста толщины эффективного диффузионного слоя со временем связано с постепенным увеличением толщины слоя интерметаллида на границе расплава.

По мере увеличения толщины слоя, все процессы диффузии замедляются, за счет меньших коэффициентов диффузии в интерметаллиде и изменением характера диффузии с жидко-твердофазного к твердофазному. Этот процесс также сопровождается изменением концентраций, а значит, уменьшением разницы химических потенциалов на границе раздела [22]. Как итог, максимальная скорость растворения материала тигля достигается в самом начале процесса и затем снижается.

Таблица 4. Значения глубины проникновения олова и температуры реакционной зоны по результатам моделирования и эксперимента

Table 4. Values of the tin penetration depth and the temperature of the reaction zone according to the results of modeling and to the results of the experiment

Измеряемая величина	Результат эксперимента	Результат моделирования	Отклонение результатов, %
Глубина проникновения олова после трех часов выдержки при температуре 1073 К, мкм	7,9	7,6	3,8
Глубина проникновения после трех часов воздействия постоянного электрического тока напряжением 1,4 В, мкм	20,8	20,3	2,4
Температура поверхности реакционной зоны, К	1074	1073	0,09

Заклучение

В результате проведенных исследований разработана математическая модель, описывающая электротермическую обработку реакционного тигля системы железо–олово. Верификация модели осуществлена путем сравнения полученных результатов по глубине проникновения олова в железо и по температуре с результатами экспериментов различной обработки. Показано, что компьютерное моделирование методом конечных элементов способно с достаточной точностью описывать процессы электродиффузии в системе реакционного тигля.

Методом математического моделирования исследовано влияние параметров обработки на поле температуры в реакционной зоне и проведен анализ диффузионных процессов железа и олова в реакционном тигле при

различных условиях проведения обработки. Рассчитана глубина проникновения олова в железный тигель под влиянием электрического тока и без него.

При синтезе в условиях электрического нагружения возрастают скорость диффузии и толщина эффективного слоя. Электрический ток оказывает решающее влияние на глубину проникновения атомов, а также значительно ускоряет все процессы диффузии и растворения внутри реакционного тигля.

Модель может быть использована при создании рекомендаций по выбору начальных параметров проведения синтеза интерметаллидов железа и олова.

Разработанная модель может быть распространена на анализ процессов электротермических обработок других систем, что поможет ускорить подбор начальных условий протекания процессов.

Литература

- Li X., Xu L., Ding L., Wang J., Shen M., Lu X., Zhu Z., Behnia K. Anomalous Nernst and Righi-Leduc effects in Mn_3Sn : Berry curvature and entropy flow // *Physical Review Letters*. 2017. V. 119. N 5. P. 056601. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.056601>
- Булат Л.П., Нefeldова И.А. О нелинейных термоэлектрических явлениях // *Вестник Международной академии холода*. 2012. № 4. С. 54–56.
- Sales B.C., Saporov B., McGuire M.A., Singh D.J., Parker D.S. Ferromagnetism of Fe_3Sn and alloys // *Scientific Reports*. 2014. V. 4. N 1. P. 7024. <https://doi.org/10.1038/srep07024>
- Predel B. Fe-Sn (Iron-Tin) // *Dy-Er-Fr-Mo*. 1995. P. 1–5. https://doi.org/10.1007/10474837_1342
- Levashov E.A., Mukasyan A.S., Rogachev A.S., Shtansky D.V. Self-propagating high-temperature synthesis of advanced materials and coatings // *International Materials Reviews*. 2017. V. 62. N 4. P. 203–239. <https://doi.org/10.1080/09506608.2016.1243291>
- Orrù R., Licheri R., Locci A.M., Cincotti A., Cao G. Consolidation/synthesis of materials by electric current activated/assisted sintering // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 2009. V. 63. N 4-6. P. 127–287. <https://doi.org/10.1016/j.msere.2008.09.003>
- Nikbakht R., Assadi H. Phase-field modelling of self-propagating high-temperature synthesis of NiAl // *Acta Materialia*. 2012. V. 60. N 10. P. 4041–4053. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.04.017>
- Lin S., Yeh C., Xie W., Liu Y., Yoshimura M. Ab initio-aided CALPHAD thermodynamic modeling of the Sn-Pb binary system under current stressing // *Scientific Reports*. 2013. V. 3. N 1. P. 2731. <https://doi.org/10.1038/srep02731>
- Fayyazi B., Skokov K.P., Fasse T., Karpenkov D.Y., 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>
- 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>
- 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)
- Goll D., Loeffler R., Hohn D., Schneider G. Reaction sintering as a high-throughput approach for magnetic materials development // *Scripta Materialia*. 2018. V. 146. P. 355–361. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2017.05.004>
- Buch A. *Pure Metals Properties: A Scientific and Technical Handbook*. ASM International, 1999. 306 p.
- 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>

References

- Li X., Xu L., Ding L., Wang J., Shen M., Lu X., Zhu Z., Behnia K. Anomalous Nernst and Righi-Leduc effects in Mn_3Sn : Berry curvature and entropy flow. *Physical Review Letters*, 2017, vol. 119, no. 5, pp. 056601. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.056601>
- Bulat L.P., Nefeldova I.A. Nonlinear thermoelectric phenomena. *Journal of International Academy of Refrigeration*, 2012, no. 4, pp. 54–56. (in Russian)
- Sales B.C., Saporov B., McGuire M.A., Singh D.J., Parker D.S. Ferromagnetism of Fe_3Sn and alloys. *Scientific Reports*, 2014, vol. 4, no. 1, pp. 7024. <https://doi.org/10.1038/srep07024>
- Predel B. Fe-Sn (Iron-Tin). *Dy-Er-Fr-Mo*, 1995, pp. 1–5. https://doi.org/10.1007/10474837_1342
- Levashov E.A., Mukasyan A.S., Rogachev A.S., Shtansky D.V. Self-propagating high-temperature synthesis of advanced materials and coatings. *International Materials Reviews*, 2017, vol. 62, no. 4, pp. 203–239. <https://doi.org/10.1080/09506608.2016.1243291>
- Orrù R., Licheri R., Locci A.M., Cincotti A., Cao G. Consolidation/synthesis of materials by electric current activated/assisted sintering. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2009, vol. 63, no. 4-6, pp. 127–287. <https://doi.org/10.1016/j.msere.2008.09.003>
- Nikbakht R., Assadi H. Phase-field modelling of self-propagating high-temperature synthesis of NiAl. *Acta Materialia*, 2012, vol. 60, no. 10, pp. 4041–4053. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.04.017>
- Lin S., Yeh C., Xie W., Liu Y., Yoshimura M. Ab initio-aided CALPHAD thermodynamic modeling of the Sn-Pb binary system under current stressing. *Scientific Reports*, 2013, vol. 3, no. 1, pp. 2731. <https://doi.org/10.1038/srep02731>
- Fayyazi B., Skokov K.P., Fasse T., Karpenkov D.Y., 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>
- 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>
- 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)
- Goll D., Loeffler R., Hohn D., Schneider G. Reaction sintering as a high-throughput approach for magnetic materials development. *Scripta Materialia*, 2018, vol. 146, pp. 355–361. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2017.05.004>
- Buch A. *Pure Metals Properties: A Scientific and Technical Handbook*. ASM International, 1999, 306 p.
- 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>

15. 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>
16. 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)
17. 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>
18. Chapman T.W. The heat capacity of liquid metals // *Materials Science and Engineering*. 1966. V. 1. N 1. P. 65–69. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(66\)90012-7](https://doi.org/10.1016/0025-5416(66)90012-7)
19. 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>
20. Torres D.N., Perez R.A., Dymant 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)
21. Neumann G., Tuijn C. *Self-Diffusion and Impurity Diffusion in Pure Metals: Handbook of Experimental Data*. Elsevier, 2011. 360 p.
22. Ishida T. The reaction of solid iron with molten tin // *Transactions of the Japan Institute of Metals*. 1973. V. 14. N 1. P. 37–44. <https://doi.org/10.2320/matertrans1960.14.37>

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>, vladislav.fomin@yandex.ru

Тукмакова Анастасия Сергеевна — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57103805600](https://orcid.org/0000-0002-9123-8983), <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>, astukmakova@itmo.ru

Болкунов Геннадий Александрович — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57202281009](https://orcid.org/0000-0003-3297-3395), <https://orcid.org/0000-0003-3297-3395>, genabolkun@gmail.com

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

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>, karpenkov_d_y@mail.ru

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>, vladislav.fomin@yandex.ru

Anastasiia S. Tukmakova — PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57103805600](https://orcid.org/0000-0002-9123-8983), <https://orcid.org/0000-0002-9123-8983>, astukmakova@itmo.ru

Gennady A. Bolkunov — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57202281009](https://orcid.org/0000-0003-3297-3395), <https://orcid.org/0000-0003-3297-3395>, genabolkun@gmail.com

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

Fedor Yu. Bochkanov — 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>, karpenkov_d_y@mail.ru

Статья поступила в редакцию 03.08.2022
Одобрена после рецензирования 07.12.2022
Принята к печати 16.01.2023

Received 03.08.2022
Approved after reviewing 07.12.2022
Accepted 16.01.2023



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»