

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ

Белоцкий И.П., Гульна Д.Ю., Левко А.В.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
г. Минск, Республика Беларусь*

Научный руководитель: Кузьмар И.И. – канд. техн. наук

Аннотация. Используя Visual Studio 2019 разработана программа, позволяющая рассчитывать параметры зародышеобразования, характерные для электрохимических процессов. Для тестирования программы использовали экспериментальные данные, полученные для процесса электроосаждения олова. Предложенное приложение позволило автоматизировать обработку данных. Рассчитаны энергия образования трехмерного зародыша, эффективная межфазная поверхностная энергия и, исходя из условия, что зародыш можно представить в виде шарового сегмента, его радиус и объем.

Ключевые слова: электрохимические покрытия, зародышеобразование

Введение. Для понимания механизмов электрохимических процессов, анализа влияния различных условий эксперимента на структуру и функциональные свойства осадков, установления оптимальных режимов формирования тонкопленочных покрытий как правило требуется проведение большого количества опытов. Применение методов математического моделирования и современных языков программирования обеспечивает успешный анализ полученных массивов данных.

В данной статье авторами была предпринята попытка упростить процесс обработки данных для получения информации о процессе зародышеобразования при формировании электрохимических покрытий. Существуют специальные лицензионные программные инженерные продукты, позволяющие проводить математические расчеты, однако, в отличие от них, мы разработали интуитивно понятный узкоспециализированный продукт, для решения конкретной исследовательской задачи.

Основная часть. Физико-математическая модель опирается на теоретический подход, описанный в [1]. Для получения исходных данных, необходимых для ввода в программу необходимо провести кинетические исследования электрохимических процессов в гальваностатическом режиме. По зависимости «потенциал–время» определили ток зародышеобразования i_3 , (это значение тока в момент максимального перенапряжения η_m) (рисунок 1). Масштабы данных [i_3 ; η_m] являются исходными для расчета.

Постарались сделать программу доступной для различных электрохимических процессов, поэтому на управляющей панели предусмотрен выбор исследуемого материала. Справочные данные об таких элементах (z - валентность разряжающегося иона; V - мольный объем выделяющегося металла), как медь, олово, серебро, висмут, никель внесена в память программы, а также предусмотрена возможность выбора другого металла (рисунок 2).

Далее, используя данные гальваностатических исследований (рисунок 1) в координатах $\lg i_3 \eta^3 - \frac{1}{\eta^2}$ строили прямую, которая отражает зависимость тока зародышеобразования от перенапряжения для процесса электролитического осаждения. Исходя из условия, что зародыш можно представить в виде шарового сегмента, с помощью феноменологических формул (1)-(5) с использованием метода наименьших квадратов и метода регрессионного анализа рассчитали основные параметры, характеризующие процесс зародышеобразования и кристаллизации электрохимических покрытий, такие как, энергия образования трехмерного за-

родыша E_3 , эффективная межфазная поверхностная энергия $\bar{\sigma}$, которая характеризует степень сродства осаждаемого металла к подложке, скорость образования зародышей, его радиус R_3 и объем V_3 .

$$\bar{\sigma} = \sqrt[3]{\frac{3kTz^2F^2E_3^2}{16\pi V^3}}, \quad (1)$$

$$N_0 = 10^{(A - \lg 2,0E_3^2kT)}, \quad (2)$$

$$\ln N = \ln N_0 - \frac{E_3^2}{\eta}, \quad (3)$$

$$R_3 = \frac{2\sigma V}{zF\eta}, \quad (4)$$

$$V_3 = \frac{32\pi\bar{\sigma}V^3}{z^3F^3\eta^3}, \quad (5)$$

В работах [2, 3] представлены результаты расчетов для электрохимических покрытий никелем и медью. Авторы продолжили исследования и протестировали программу на примере электрохимических покрытий на основе олова.

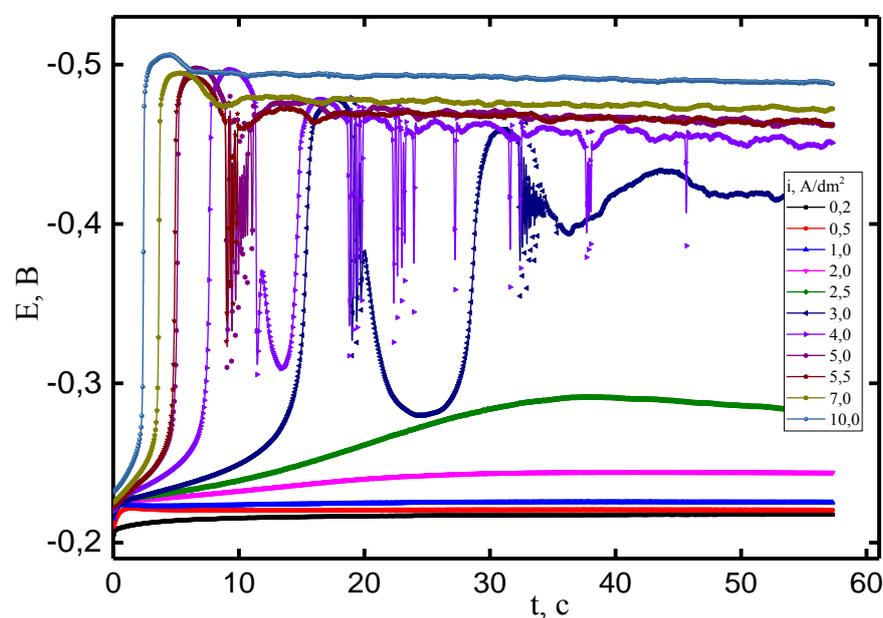


Рисунок 1 – Зависимость «потенциал–время»

Результаты расчетов выводятся на экран и могут быть сохранены в файл формата *.xlsx. Пример результатов расчетов программой представлен на рисунке 3.

Для тестирования приложения рассчитали параметры зародышеобразования. Установили, что результаты параллельных расчетов совпадают (таблица).

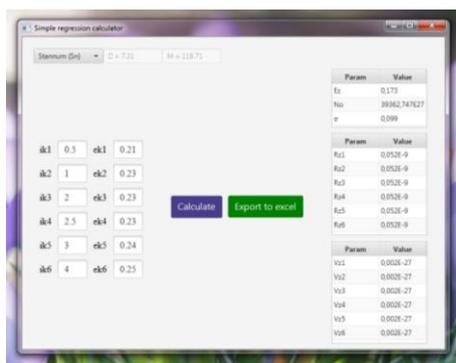


Рисунок 2 – Панель программы для ввода экспериментальных данных

	Param	Value	Param	Value	Param	Value
2	Ez	0.173259	Rz1	5.24E-11	Vz1	1.81E-30
3	No	3.94E+31	Rz2	5.24E-11	Vz2	1.8E-30
4	σ	0.098672	Rz3	5.24E-11	Vz3	1.8E-30
5			Rz4	5.24E-11	Vz4	1.8E-30
6			Rz5	5.24E-11	Vz5	1.8E-30
7			Rz6	5.23E-11	Vz6	1.8E-30

Рисунок 3 – Пример файла, полученного в результате работы программы

Заключение. Предложено приложение для решения конкретной исследовательской задачи – расчета параметров зародышеобразования для электрохимического процесса формирования покрытий.

Список литературы

1. О применении метода гальваностатического включения при исследовании электрокристаллизации на чужеродной подложке / В.М. Рудой [и др.] // Электрохимия. - 1975. - Т. 11, № 4. - С. 566–570.
2. Кузьмар, И.И. Влияние состава электролита медиения и условий электролиза на процесс зародышеобразования / И.И. Кузьмар [и др.] // Материалы Международной научно-технической конференции «INTERMATIC-2016», 21-25 ноября 2016 г., г. Москва. / Под ред. академика РАН А.С. Сигова. – М.: Галлея-Принт, 2016, часть 4. – С. 169-172.
3. Формирование композиционных покрытий при воздействии ультразвука / А.А. Хмыль [и др.] // Порошковая металлургия: инженерия поверхности, новые порошковые композиционные материалы. Сварка = Powder Metallurgy: Surface Engineering, New Powder Composite Materials, Welding: сб. докл. Междунар. симп. (Минск, 10-12 апр. 2013 г.) В 2 ч. Ч2 / Нац. акад. наук Беларуси [и др.]; редкол. : П.А. Витязь (гл. ред.) [и др.]. – Минск: Белору. наука, 2013. – С. 319-324.

UDC 621.357.7

CALCULATION OF NUCLEATION PARAMETERS DURING THE FORMATION OF ELECTROCHEMICAL COATINGS

Belotske I.P., Gulpa D.Y., Levko A.V.

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

Kuzmar I.I. – PhD

Annotation. Using Visual Studio 2019, a program has been developed that allows to calculate the nucleation parameters characteristic of electrochemical processes. To test the program, we used the experimental data obtained for the tin electrodeposition process. The proposed product made it possible to automate data processing. The energy of formation of a three-dimensional nucleus, the effective interfacial surface energy and, proceeding from the condition that the nucleus can be represented as a spherical segment, its radius and volume are calculated.

Keywords. electrochemical coatings, nucleation