

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КОМПОЗИЦИОННЫХ СИСТЕМ с ФУЛЛЕРЕНОПОДОБНЫМИ СТРУКТУРАМИ

Никитин Д. А., Никитин А. В., Лиопо В. А., Струк В. А.
Гродненский государственный университет им. Янки Купалы,
Гродно, Беларусь, nik@grsu.unibel.by

Состав композиционной системы в общем случае может характеризоваться концентрациями компонентов ρ_i , где $i=1..N$, N - число компонентов. Средний коэффициент теплопроводности такой системы может быть рассчитан по формуле:

$$\lambda = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \lambda_i \rho_i \quad (1)$$

Формула (1) удовлетворительно работает, когда значения концентраций ρ_i различных компонентов приблизительно одинаковы. Такое же ограничение накладывается и на значения коэффициентов теплопроводности компонентов λ_i . Более того, когда разница в значениях этих параметров компонентов существенна, могут возникать фазовые переходы (проводник-изолятор), обусловленные образованием компонентами перколяционных кластеров. Таким образом, формула (1) в большинстве случаев не может быть использована даже для качественной оценки. Применение наполнителя— частиц с фуллереноподобной структурой, кластеризация этих частиц еще более усложняют анализ процессов переноса.

Нами предлагается метод расчета коэффициента теплопроводности композиционной системы, реализованный в виде компьютерной модели. Структура композита генерируется на объемной решетке в соответствии с концентрациями компонентов. Стационарное уравнение теплопроводности для такой системы может быть записано в виде:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0 \quad (2)$$

Представим (2) в конечноразностном виде:

$$\begin{aligned}
 T_{ijk} = & \{ [T_{i-1,jk} \frac{\lambda_{ijk} - \lambda_{i-1,jk}}{\Delta x^2} + T_{i,j-1,k} \frac{\lambda_{ijk} - \lambda_{i,j-1,k}}{\Delta y^2} + \\
 & T_{i,j,k-1} \frac{\lambda_{ijk} - \lambda_{i,j,k-1}}{\Delta z^2}] - \lambda_{ijk} [-\frac{T_{i-1,jk} - T_{i+1,jk}}{\Delta x^2} + \\
 & \frac{T_{i,j-1,k} + T_{i,j+1,k}}{\Delta y^2} + \frac{T_{i,j,k-1} + T_{i,j,k+1}}{\Delta z^2}] \} \{ [\frac{\lambda_{ijk} - \lambda_{i-1,jk}}{\Delta x^2} + \\
 & \frac{\lambda_{ijk} - \lambda_{i,j-1,k}}{\Delta y^2} + \frac{\lambda_{ijk} - \lambda_{i,j,k-1}}{\Delta z^2}] - 6\lambda_{ijk} [\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \\
 & + \frac{1}{\Delta z^2}] \}^{-1}
 \end{aligned} \quad (3)$$

i, j, k – индексы ячеек решетки, соответственно по осям x, y, z .

Граничные условия имеют вид:

$$T = T_b, x = 0; Y > y > 0, Z > z > 0;$$

$$T = T_e, x = X; Y > y > 0, Y > y > 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = 0; X > x > 0; y = 0, Y; Z > z > 0; \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0; X > x > 0; Y > y > 0, Y; z = 0, Z$$

Задача (3)-(4) нами решена методом релаксаций. В результате по температурному полю на границе $x=0$ или $x=X$ рассчитывался тепловой поток q и далее средний коэффициент теплопроводности композита:

$$\lambda_c = \left| \frac{qX}{(T_e - T_b)} \right|$$

В качестве объекта исследования взят композиционный материал на основе полимера с наполнителем, имеющим фуллереноподобную структуру. Коэффициент теплопроводности ядра и самой фуллереноподобной структуры частиц могут быть заданы функциями $\lambda(r)$ различного вида.