УДК 536.2

И. Ю. Савельева

ЭФФЕКТИВНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ КОМПОЗИТА ПРИ НАЛИЧИИ ПРОМЕЖУТОЧНОГО СЛОЯ МЕЖДУ ШАРОВЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ И МАТРИЦЕЙ

Построена математическая модель переноса тепловой энергии в композите с включениями шаровой формы (в общем случае в виде полых шаров). Учтена возможность возникновения промежуточного слоя между включениями и матрицей. Получены оценки эффективного коэффициента теплопроводности такого композита, в том числе с применением двойственной формулировки вариационной задачи стационарной теплопроводности в неоднородном твердом теле. Проведенный параметрический анализ позволил установить области применения найденных оценок, которые могут быть использованы для прогноза эффективного коэффициента теплопроводности композитов, в частности, модифицированных наноструктурными элементами.

E-mail: Inga.Savelyeva@gmail.con

Ключевые слова: *композит, эффективный коэффициент теплопроводности, промежуточный слой.*

Модификация композитов наноструктурными элементами (в том числе фуллеренами), имеющими высокие механические характеристики, позволит повысить макроскопические характеристики композитов в целом как конструкционных материалов. Для конструкций, испытывающих одновременно как механические, так и тепловые воздействия, помимо информации о механических характеристиках композита важно располагать данными и о его теплофизических свойствах (в частности, о коэффициенте теплопроводности). Эффективное значение коэффициента теплопроводности композита, модифицированного наноструктурными элементами, зависит от их объемной концентрации C_V, от соотношения между коэффициентами теплопроводности матрицы и применяемых при модификации элементов, а также от условий теплового контакта между этими элементами и матрицей. Эти условия могут быть связаны с возможным химическим взаимодействием включения и матрицы, приводящим к образованию между ними промежуточного слоя с коэффициентом теплопроводности, отличным от коэффициентов теплопроводности как включения, так и матрицы. В данной работе ограничимся рассмотрением композита, модифицированного элементами в виде полого шара, который можно считать приемлемым приближением к геометрической форме фуллерена [1, 2].

Математическую модель переноса тепловой энергии в композите построим в предположении, что шаровые включения в общем случае не контактируют между собой, т.е. отделены друг от друга слоем материала матрицы. Композит считаем состоящим из множества составных шаровых частиц с наружным радиусом R_2, каждая из которых включает полый шар с наружным радиусом R_1, окруженный промежуточным шаровым слоем толщиной $R_* - R_1$, и шарового слоя толщиной $R_2 - R_*$ из материала матрицы. Примем, что такая составная частица является представительным элементом структуры композита и в тепловом отношении взаимодействует с неограниченным массивом однородного материала, коэффициент теплопроводности λ которого подлежит определению как эффективная характеристика композита. Таким образом, модель композита содержит четыре фазы: включение, промежуточный слой, слой матрицы и неограниченный массив однородного материала. При этом отношение R_1^3/R_2^3 будем считать объемной концентрацией C_V включений в композите.

Рассмотрим тепловое взаимодействие отдельно взятой составной частицы и окружающего ее однородного материала, полагая коэффициенты теплопроводности λ_1, λ_* и λ_2 материалов соответственно полого шара, промежуточного слоя и матрицы заданными. Тепловой контакт на каждой из сферической поверхности, разделяющей контактирующие фазы, примем идеальным.

Центр полого шара с внутренним радиусом R_0 поместим в начале сферической системы координат. Примем, что на большом расстоянии $r \gg R_2$ от начала координат задан вектор градиента температурного поля в однородном материале, направленный по оси сферической системы координат, от которой происходит отсчет угловой координаты θ, т. е. при $r \to \infty$ установившееся распределение температуры в этом материале описывает функция $T_\infty(r,\,\theta) = Gr\cos\theta$, где G — модуль вектора градиента. Эта функция удовлетворяет уравнению Лапласа, которое в сферических координатах имеет вид

$$\frac{1}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\,\frac{\partial T}{\partial r}\Big) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\,\frac{\partial T}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2 T}{\partial\varphi^2} = 0. \qquad (1)$$

В данном случае благодаря параллельности заданного вектора градиента температурного поля и оси отсчета угловой координаты θ распределение температуры симметрично относительно этой оси и не зависит от угловой координаты φ, т.е. $\partial^2 T/\partial\varphi^2 \equiv 0$.

По мере приближения к составной шаровой частице температурное поле в однородном материале претерпевает возмущение, описываемое также удовлетворяющим уравнению (1) дополнительным слагаемым [3] $\Delta T(r,\theta) = (B/r^2)\cos\theta$, где B — подлежащий определению постоянный коэффициент. Таким образом, температурное поле в однородном материале, удовлетворяющее заданному условию при $r \to \infty$ и уравнению (1), описывает функция

$$T(r,\theta) = T_\infty(r,\theta) + \Delta T(r,\theta) = (Gr + B/r^2)\cos\theta. \tag{2}$$

Аналогичные зависимости описывают распределения температуры в шаровом включении

$$T_1(r,\theta) = (A_1 r + B_1/r^2)\cos\theta, \tag{3}$$

в промежуточном слое

$$T_*(r,\theta) = (A_* r + B_*/r^2)\cos\theta \tag{4}$$

и в слое материала матрицы

$$T_2(r,\theta) = (A_2 r + B_2/r^2)\cos\theta. \tag{5}$$

В равенства (2)–(5) входят 7 неизвестных коэффициентов B, A_1, B_1, A_*, B_*, A_2 и B_2, которые необходимо найти из граничных условий на сферических поверхностях с радиусами R_0, R_1, R_* и R_2. При $r = R_0$ из условия отсутствия теплообмена в полости шарового включения с учетом равенства (3) получим

$$\partial T_1/\partial r\Big|_{r=R_0} = (A_1 - 2B_1/R_0^3)\cos\theta = 0,$$

или

$$A_1 = 2B_1/R_0^3. \tag{6}$$

При $r = R_1$ из условий непрерывности плотности теплового потока и распределения температуры следует

$$\lambda_1\,\partial T_1/\partial r\Big|_{r=R_1} = \lambda_*\,\partial T_*/\partial r\Big|_{r=R_1} \text{ и } T_1(R_1,\,\theta) = T_*(R_1,\,\theta).$$

Отсюда с использованием равенств (3) и (4) находим

$$A_1 - 2B_1/R_1^3 = (\lambda_*/\lambda_1)(A_* - 2B_*/R_1^3) \text{ и } A_1 + B_1/R_1^3 = A_* + B_*/R_1^3. \tag{7}$$

Из аналогичных условий при $r = R_*$ с учетом формул (4) и (5) следует

$$A_* - 2B_*/R_*^3 = (\lambda_2/\lambda_*)(A_2 - 2B_2/R_*^3) \text{ и } A_* + B_*/R_*^3 = A_2 + B_2/R_*^3. \tag{8}$$

Наконец, из подобных условий при $r = R_2$ и соотношений (2) и (6) получим

$$A_2 - 2B_2/R_2^3 = (\lambda/\lambda_2)(G - 2B/R_2^3) \text{ и } A_2 + B_2/R_2^3 = G + B/R_2^3. \tag{9}$$

Последовательным исключением неизвестных из равенств (6)...(9) находим

$$\frac{B}{R_2^3} = G\frac{\widetilde{\lambda}(1 + \bar{R}_*^3 d) - 1 + 2\bar{R}_*^3 d}{2\widetilde{\lambda}(1 + \bar{R}_*^3 d) + 1 - 2\bar{R}_*^3 d}, \tag{10}$$

где $\widetilde{\lambda} = \lambda/\lambda_2$, $\bar{R}_* = R_*/R_2$,

$$d = 3\frac{1 + b\,C_V/\bar{R}_*^3}{2 + \bar{\lambda}_* + 2b\,(1 - \bar{\lambda}_*)C_V/\bar{R}_*^3} - 1,\ \ b = \frac{1 - \bar{\lambda}/\bar{\lambda}_* + (1 + 2\bar{\lambda}/\bar{\lambda}_*)\bar{R}_0^3/2}{2 + \bar{\lambda}/\bar{\lambda}_* + (1 - \bar{\lambda}/\bar{\lambda}_*)\bar{R}_0^3},$$

$C_V = R_1^3/R_2^3$, $\bar{\lambda}_* = \lambda_*/\lambda_2$, $\bar{\lambda} = \lambda_1/\lambda_2$ и $\bar{R}_0 = R_0/R_1$. В случае включения в виде сплошного шара $\bar{R}_0 = 0$ и $b = b_0 = (1 - \bar{\lambda}/\bar{\lambda}_*)/(2 + \bar{\lambda}/\bar{\lambda}_*)$.

Замена составной шаровой частицы равновеликим шаром радиусом R_2 с искомым коэффициентом теплопроводности λ приведет к исчезновению возмущения температурного поля в окружающем ее однородном материале с тем же значением λ. Тогда в равенстве (2) следует положить $\Delta T(r,\theta) = 0$, что равносильно условию $B = 0$, которое с учетом формулы (10) позволяет записать

$$\widetilde{\lambda} = (1 - 2\bar{R}_*^3 d)/(1 + \bar{R}_*^3 d). \tag{11}$$

Эта формула сохраняет смысл при условии $C_V \leq C_V^* = (R_1/R_*)^3$, поскольку при $C_V = C_V^*$ в составной частице уже отсутствует шаровой слой матрицы. В частном случае отсутствия промежуточного слоя $\bar{R}_*^3 = C_V$ и равенство (11) при $\bar{\lambda}_* = \bar{\lambda}$ и $\bar{R}_0 = 0$ переходит в известную формулу Максвелла [3]

$$\widetilde{\lambda} = \frac{2 + \bar{\lambda} - 2(1 - \bar{\lambda})C_V}{2 + \bar{\lambda} + (1 - \bar{\lambda})C_V},$$

полученную на основе более простой двухфазной модели, состоящей из включения в виде сплошного шара и окружающего его материала матрицы.

Для оценки возможной погрешности формулы (11) используем двойственную вариационную формулировку задачи стационарной теплопроводности [4, 5], позволяющую получить двусторонние оценки эффективного коэффициента теплопроводности рассматриваемого композита. Область V, содержащую представительный элемент в виде половины составной частицы радиусом R_2, выберем в виде прямого цилиндра с достаточно большой площадью S_0 параллельных оснований, одно из которых соответствует в сферических координатах значению $\theta = \pi/2$, а точки второго имеют координаты $r\cos\theta = H$, т.е. высота цилиндра равна H, причем $H \gg R_2$. Боковую поверхность цилиндра примем идеально теплоизолированной, температуру основания при $\theta = \pi/2$ положим равной нулю, а на втором основании зададим температуру GH. Однородный материал в части области вне составной частицы имеет коэффициент теплопроводности λ. Таким образом, в неоднородной цилиндрической области объемом $V_0 = HS_0$, ограниченной поверхностью S, распределение температуры $T(M)$ и коэффициент теплопроводности $\lambda(M)$ являются функциями координат точки $M \in V$, причем функция $\lambda(M)$ кусочно постоянная и принимает значения λ_1 при $r \leq R_1$, λ_* при $R_1 \leq r \leq R_*$, λ_2 при $R_* \leq r \leq R_2$ и λ при $r \geq R_2$.

Примем в качестве допустимого для минимизируемого функционала [5]

$$J[T] = \frac{1}{2}\int\limits_V \lambda(M)\big(\nabla T(M)\big)^2\,dV(M), \qquad (12)$$

где ∇ — дифференциальный оператор Гамильтона, линейное по высоте цилиндра распределение температуры с постоянной составляющей градиента G. В этом случае из формулы (12) получим

$$J_1[T] = \frac{G^2}{2}\Bigg(\lambda H S_0 - \frac{2\pi R_2^3}{3}\lambda + 2\pi\frac{R_2^3 - R_*^3}{3}\lambda_2 + \\ + 2\pi\frac{R_*^3 - R_1^3}{3}\lambda_* + 2\pi\frac{R_1^3 - R_0^3}{3}\lambda_1\Bigg). \qquad (13)$$

Для максимизируемого функционала [5]

$$I[\mathbf{q}] = -\frac{1}{2}\int\limits_V \frac{\big(\mathbf{q}(M)\big)^2}{\lambda(M)}\,dV(M) - \\ - \int\limits_S T(P)\mathbf{q}(P)\cdot\mathbf{n}(P)\,dS(P), \quad P \in S, \qquad (14)$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор внешней нормали к поверхности S, в качестве допустимого распределения вектора плотности теплового потока $\mathbf{q}$ примем постоянное значение $q = -\lambda G$ единственной составляющей этого вектора, перпендикулярной основаниям цилиндра. Тогда формула (14) примет вид

$$I_1[q] = -\frac{(\lambda G)^2}{2}\Bigg(\frac{HS_0 - 2\pi R_2^3/3}{\lambda} + 2\pi\frac{R_2^3 - R_*^3}{3\lambda_2} + \\ + 2\pi\frac{R_*^3 - R_1^3}{3\lambda_*} + 2\pi\frac{R_1^3 - R_0^3}{3\lambda_1}\Bigg) + +\lambda G^2 H S_0. \qquad (15)$$

Принятые допустимые распределения температуры и плотности теплового потока для неоднородной области отличаются от действительных и поэтому значения $J_1[T]$ и $I_1[q]$ не будут совпадать, причем $J_1[T] > I_1[q]$. В промежутке между этими значениями должно быть расположено и значение $J_0 = (\lambda/2)G^2 H S_0$ минимизируемого функционала (12) для однородной области с коэффициентом теплопроводности λ. Тогда при $(R_1/R_2)^3 = C_V$ с учетом формулы (13) из условия

$J_1[T] \geq J_0$ получим

$$\widetilde{\lambda} \leq 1 - \bar{R}_*^3 + \bar{\lambda}_*(\bar{R}_*^3 - C_V) + \bar{\lambda} C_V (1 - \bar{R}_0^3) = \widetilde{\lambda}_+,$$

а при использовании формулы (15) из условия $I_1[q] \leq J_0$ найдем

$$\widetilde{\lambda} \geq \frac{1}{1 - \bar{R}_*^3 + (\bar{R}_*^3 - C_V)/\bar{\lambda}_* + C_V(1 - \bar{R}_0^3)/\bar{\lambda}} = \widetilde{\lambda}_-.$$

Для примера расчета примем $R_*^3 = 2R_1^3$ и $\lambda_* = (\lambda_1 + \lambda_2)/2$, т. е. $\bar{R}_*^3 = 2\,C_V$ и $\bar{\lambda}_* = (1 + \bar{\lambda})/2$. В этом случае $C_V \in [0,\ C_V^*]$, где $C_V^* = 0{,}5$. На рис. 1 для случая $R_0 = 0$ при различных значениях $\bar{\lambda}$ приведены графики зависимостей от C_V верхней $\widetilde{\lambda}_+$ (штрихпунктирные линии) и нижней $\widetilde{\lambda}_-$ (штриховые линии) оценок отношения $\widetilde{\lambda} = \lambda/\lambda_2$. Сплошными линиями представлены графики зависимостей $\widetilde{\lambda}$, построенные по формуле (11). Результаты аналогичных расчетов при $\bar{R}_*^3 = 1,25\,C_V$ и $\bar{\lambda}_* = (1 + \bar{\lambda})/2$ в промежутке $C_V \in [0,\ C_V^*]$, где теперь $C_V^* = 0{,}8$, приведены на рис. 2. Отметим, что во всех случаях $\widetilde{\lambda} = \widetilde{\lambda}_+ = \widetilde{\lambda}_- = 1$ при $\bar{\lambda} = 1$.

Из сопоставления графиков на рисунках следует, что при малом отличии значения $\bar{\lambda}$ от единицы формула (11) достаточно хорошо описывает зависимость эффективного коэффициента теплопроводности от объемной концентрации шаровых включений во всем промежутке изменения C_V. По мере отклонения $\bar{\lambda}$ от единицы несмотря на сближение оценок при $C_V = C_V^*$ разность $\widetilde{\lambda}_+ - \widetilde{\lambda}_-$ для промежуточных значений C_V становится значительной. Причиной этого является, видимо, использование достаточно простых допустимых распределений

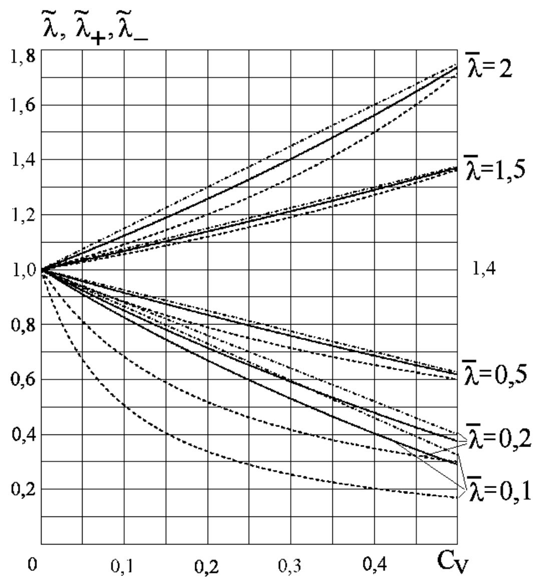

Рис. 1

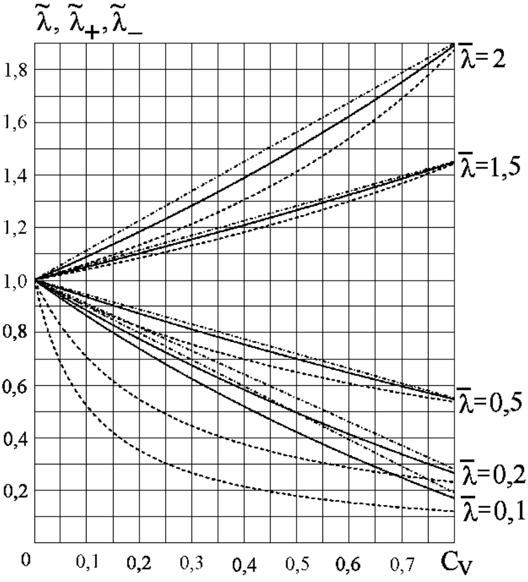

Рис. 2

температуры и плотности теплового потока при вычислении функционалов. Можно ожидать, что построение более близких к действительным распределений позволит уменьшить разность $\widetilde{\lambda}_+ - \widetilde{\lambda}_-$ и тем самым точнее оценить возможную погрешность формулы (11).

Работа выполнена по гранту НШ–255.2012.8 программы государственной поддержки ведущих научных школ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. К а ц Е. А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры. Родословная форм и идей. – М.: Изд-во ЛКИ, 2008. 296 с.
2. П о з д н я к о в В. А. Физическое материаловедение наноструктурных материалов. – М.: МГИУ, 2007. – 424 с.
3. К а р с л о у Г., Е г е р Д. Теплопроводность твердых тел: Пер. с англ. – М.: Наука, 1964. – 488 с.
4. З а р у б и н В. С. Инженерные методы решения задач теплопроводности. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 328 с.
5. З а р у б и н В. С., К у в ы р к и н Г. Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. – 512 с.

Статья поступила в редакцию 05.09.2012