

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Автоматики і комп'ютеризованих технологій
(повна назва)

Кафедра Комп'ютерно-інтегрованих технологій, автоматизації та робототехніки
(повна назва)

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

Пояснювальна записка

Другий (магістерський)

(рівень вищої освіти)

Розроблення програмного забезпечення для автоматизації процесу
структурного моделювання та розрахунку ефективної теплопровідності
поліімідних композитних плівок

(тема)

Виконав:

студент V курсу, групи КІТПВм-22-2

Борщов І.В.

(прізвище, ініціали)

Спеціальність 151 Автоматизація та
комп'ютерно-інтегровані технології

(код і повна назва спеціальності)

Тип програми Освітньо-професійна

(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма Комп'ютерно-інтегровані
технологічні процеси і виробництва

(повна назва освітньої програми)

Керівник проф. Новоселов С.П.

(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри

(підпис)

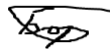
Невлюдов І. Ш.

(прізвище, ініціали)

2024 р.

Я Борщов Ілля Вячеславович, як студент ХНУРЕ, розумію і підтримую політику закладу із академічної доброчесності. Я не надавав і не одержував недозволену допомогу під час підготовки кваліфікаційної роботи. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

« 11 » Січня 2024 р.



(підпис)

Борщов І.В.

(прізвище, ініціали)

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ РАДІОЕЛЕКТРОНІКИ

Факультет Автоматики і комп'ютеризованих технологій
 Кафедра Комп'ютерно-інтегрованих технологій, автоматизації та робототехніки
 Рівень вищої освіти другий (магістерський)
 Спеціальність 151 Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології
 (код і повна назва)
 Тип програми Освітньо-професійна
 (освітньо-професійна або освітньо-наукова)
 Освітня програма Комп'ютерно-інтегровані технологічні процеси і виробництва
 (код і повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри

(підпис)

«___» _____р.

ЗАВДАННЯ**НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ**

студентові Борщову Іллі В'ячеславовичу
 (прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Розроблення програмного забезпечення для автоматизації процесу структурного моделювання та розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитних плівок

затверджена наказом університету від 03. 11. 2023 р. №. 1287 Ст

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії «17. 01. 2024 р.

3. Вихідні дані до роботи . Об'єкт розробки – програмне та організаційне забезпечення автоматизованих розрахунків ефективної теплопровідності III композитів

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі . 4.1 Аналіз предметної області 4.2 Аналіз особливостей автоматизації процесу проектування та моделювання нових теплопровідних композитних поліімідних плівок 4.4 Структурне моделювання для розрахунку ефективної теплопровідності теплопровідних поліімідних композитних плівок за аналітичною моделлю Бургера та моделлю перколяції 4.5 Розробка та написання програми «Теплопровідність поліімідного композиту» для автоматизації процесу розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитних плівок за аналітичною моделлю Бургера та моделлю перколяції

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій (слайдів) Демонстраційний матеріал представлений у форматі презентації PowerPoint (*.ppt) – 12 с. формату А4

6. Консультанти розділів роботи (п.6 включається до завдання за наявності консультантів згідно з наказом, зазначеним у п.1)

Найменування розділу	Консультант (посада, прізвище, ім'я, по батькові)	Позначка консультанта про виконання розділу	
		підпис	дата

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Отримання завдання на кваліфікаційну роботу	06.06.2023	Виконано
2	Аналіз літератури та супутніх джерел	10.09.2023	Виконано
3	Аналіз теоретичних та методологічних основ	12.09.2023	Виконано
4	Аналіз сучасних перспективних теплопровідних електроізоляційних композитних полімідних матеріалів	15.10.2023	Виконано
5	Постановка задач досліджень	17.10.2023	Виконано
6	Вивчення основних понять теплопровідності та теоретичних моделей теплопровідності, у тому числі аналітичних моделей Бургера та перколяції	20.10.2023	Виконано
7	Підбір літературних джерел, консультації з керівником дослідної роботи	25.11.2023	Виконано
8	Вивчення особливостей автоматизованого програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS та освоєння навиків роботи з ним	26.11.2023	Виконано
9	Завершення аналізу навчальної, методичної та наукової літератури та написання теоретичного розділу магістерської роботи	01.12.2023	Виконано
10	Оформлення експериментальної частини та презентаційних матеріалів	05.01.2024	Виконано
11	Подання роботи на рецензування	12.01.2024	Виконано
12	Попередній захист	16.01.2024	Виконано
13	Подання роботи до екзаменаційної комісії	17.01.2024	Виконано

Дата видачі завдання «06» червня 2023 р.

Студент _____

(підпис)

Керівник роботи _____

проф. Новоселов С.П.

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка: 102 с., 2 табл., 57 рис., 2 додатка, 43 джерела посилання.

ТЕПЛОВИЙ ПОТІК, КОЕФІЦІЄНТ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ, ПОЛІІМІДНІ ПЛІВКИ, КОМПОЗИТИ, СТРУКТУРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, 3D – МОДЕЛЮВАННЯ, МОДЕЛЬ ПЕРКОЛЯЦІЇ, МОДЕЛЬ БУРГЕРА

Об'єкт дослідження – процес структурного моделювання та розрахунку теплопровідності.

Предмет дослідження – програмне забезпечення для автоматизації процесу розрахунку.

Мета роботи – створення програмного організаційного забезпечення для автоматизації, підвищення точності і скорочення часу розрахунків теплопровідності поліімідних композитних плівок що розробляються.

Методи дослідження – 3D-структурне моделювання, комп'ютерне моделювання, чисельне моделювання.

Для досягнення поставленої були проаналізовані особливості сучасних перспективних теплопровідних електроізоляційних композитних поліімідних матеріалів, проведено структурне моделювання для розрахунку ефективної теплопровідності теплопровідних поліімідних композитних плівок за аналітичною моделлю Бургера та моделлю перколяції, розроблено програму «Теплопровідність поліімідного композиту», проведено 3D-структурне моделювання поліімідних композитних плівок і розрахунки ефективних коефіцієнтів теплопровідності III композитних плівок за допомогою програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS.

ABSTRACT

Explanatory note: 102 p., 2 tabl., 57 pic., 2 applications, 43 sources.

HEAT FLOW, THERMAL CONDUCTIVITY COEFFICIENT, POLYIMIDE FILMS, COMPOSITES, STRUCTURAL MODELING, 3D - MODELING, PERCOLATION MODEL, BURGER MODEL

The object of research is the process of structural modeling and calculation of thermal conductivity.

The subject of research is Software for automating the calculation process.

The purpose of the work is to create a software organization for automating, increasing the accuracy and reducing the time of thermal conductivity calculations of polyimide composite films that are being developed. Research methods – 3D structural modeling, computer modeling, numerical modeling.

To achieve the goal, the features of modern promising thermally conductive and electrically insulating composite polyimide materials were analyzed, structural modeling was carried out to calculate the effective thermal conductivity of thermally conductive polyimide composite films according to Burger's analytical model and the percolation model, the program "Thermal conductivity of polyimide composite" was developed, 3D structural modeling of polyimide composite films was carried out and calculations of effective coefficients of thermal conductivity PI of composite films using the COMSOL MULTIPHYSICS software complex.

ЗМІСТ

Перелік скорочень	9
Вступ.....	14
1 Аналіз предметної області.....	16
1.1 Аналіз особливостей автоматизації процесу проектування та моделювання нових теплопровідних композитних поліімідних плівок.....	16
1.1.1 Особливості сучасних перспективних теплопровідних електроізоляційних поліімідних композитних матеріалів.....	16
1.1.2 Композити на основі полімерних матриць та методи їх отримання.....	19
1.1.3 Матеріали порошків для створення електроізолюючих теплопровідних поліімідних композиційних матеріалів.....	22
1.1.4 Основні поняття теплопровідності.....	24
1.1.5 Теоретичні моделі теплопровідності.....	25
1.1.6 Особливості автоматизованого програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS та навички роботи з ним.....	34
1.2 Висновки до теоретичної роботи.....	37
2 Структурне моделювання для розрахунку ефективної теплопровідності теплопровідних поліімідних композитних плівок	39
2.1 Структурне моделювання теплопровідних поліімідних композитів.....	39
2.2 Розрахункова модель теплопровідності КМ за формулою Бургера.....	42
2.3 Розрахункова модель теплопровідності КМ за моделлю перколяції (порога протікання).....	43
2.4 Висновки до другого розділу.....	44
3 Розробка та написання програми «Теплопровідність поліімідного композиту» для автоматизації процесу розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитних плівок.....	45
3.1 Особливості програми.....	45
3.2 Архітектура.....	46

3.3 Інтерфейс користувача.....	47
3.4 Розгортання.....	57
3.5 Логування.....	57
3.6 Розробка інструкції щодо застосування програм «Теплопровідність поліімідного композиту».....	58
3.6.1 Завантаження та запуск програми.....	58
3.6.2 Розрахунок коефіцієнта теплопровідності композиту за моделлю Бургера.....	59
3.6.3 Розрахунок коефіцієнта теплопровідності композиту за моделлю перколяції.....	61
3.6.4 Розрахунок та вибір коефіцієнта «С» за експериментальними даними для розрахунків теплопровідності за моделлю Бургера.....	63
3.6.5 Розрахунок об'ємної та масової концентрації компонентів композиту.....	
3.6.6 Збереження даних розрахунку.....	64
3.6.7 Експорт точок графіка залежності.....	66
3.7 Висновки до розділу з розробки програми для автоматизації процесу розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитних плівок.....	66
4 Експериментальні дослідження.....	67
4.1 Дослідження методу прямого моделювання поліімідних композиційних структур з урахуванням граничних та початкових умов.....	67
4.2 Виконання 3D - структурного моделювання комірок дослідних поліімідних композитних плівок та розрахунків їх середніх теплових потоків та ефективних коефіцієнтів теплопровідності за допомогою застосування стандартного програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS.....	73
4.3 Розробка інструкції щодо застосування програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS.....	79
4.3.1 Створення середи моделювання стаціонарної теплової задачі в програмі COMSOL MULTIPHYSICS	80
4.3.2 Глобальні визначення (Global Definitions)	81
4.3.3 Побудова геометрії комірки поліімідної композиційної теплопровідної плівки з рівномірним розташуванням частинок.....	82

4.3.3.1 Побудова геометрії комірки з однією сферичною частинкою (Модель 1).....	82
4.3.3.2 Побудова геометрії комірки з однією сферичною частинкою яка доповнюється 328 елементарними кубічними комірками з однією сферичною частинкою (Модель 2).....	83
4.3.3.3 Побудова геометрії комірки з однією сферичною частинкою яка доповнюється 3224 елементарними кубічними комірками з однією сферичною частинкою (Модель 3).....	85
4.3.4 Materials (Матеріали).....	86
4.3.5 Фізичний інтерфейс та граничні умови.....	87
4.3.6 Створення сітки (Mesh).....	88
4.3.7 Study (Дослідження).....	89
4.3.7 Results (Результати).....	90
4.3.9 Створення автоматизованої програми для розрахунку ефективної теплопровідності в середі розробки програм в COMSOL MULTIPHYSICS.....	91
4.3.10 Інструкція по розрахунку середнього теплового потоку і ефективної теплопровідності комірки в автоматизованій програмі (Form).....	95
4.4 Охорона праці.....	96
4.4.1 Пожежна безпека.....	97
4.5 Висновки до експериментального дослідження.....	97
Висновки.....	98
Перелік джерел посилання.....	99
Додаток А Текст програми	105
Додаток Б Публікація до кваліфікаційної роботи.....	123
Додаток В Демонстраційний матеріал.....	136

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ

ГНБ – гексагональний нітрид бору;

НБ – нітрид бору;

ПАК – термопластичні поліамідокислоти;

ПЗ – програмне забезпечення;

ПІ – поліімідні;

ПКМ – полімерні композиційні матеріали;

ТПМ – теплопровідні полімерні матеріали.

ВСТУП

При використанні поліімідних композитних матеріалів у системах електричної ізоляції та комутуючих елементів електронних вузлів актуальним є завдання покращення теплопередачі з одночасним збереженням високих діелектричних характеристик теплопровідних поліімідних шарів.

Прогнозування ефективної теплопровідності наповнених поліімідних систем вимагає знання не тільки теплових властивостей складових компонентів, але й ряд інших факторів. Дуже важливим з цієї точки зору є розробка моделі наповненого полііміду, а також моделювання граничних шарів, які дуже впливають на властивості наповненої композитної системи. Необхідно враховувати, що механізми впливу матриці та наповнювача на теплопровідність різні за різних концентрацій. Управління властивостями поліімідних композитних матеріалів має забезпечуватися не тільки збільшенням концентрації, а також збільшенням модифікуючої дії наповнювача (за рахунок дисперсності та інших факторів).

Для розробки нових теплопровідних поліімідних (ПІ) композитних плівок слід вибирати такі сполучні та наповнювачі, які забезпечують оптимальні значення теплофізичних, фізико-механічних та діелектричних характеристик поліімідних матеріалів.

Оскільки поліімідний композит є як правило двокомпонентною системою, для розрахунку теплопровідності доцільно використовувати аналітичні моделі для вирішення теплофізичних задач. Це дозволяє для наближених розрахунків ефективної теплопровідності двокомпонентних сумішей для широкого діапазону вмісту порошкових наповнювачів у композитах використовувати прості лінійні моделі, наприклад формулу Бургера та модель перколяції. Для підвищення ефективності таких розрахунків необхідна розробка спеціалізованих програм, які дозволять автоматизувати і прискорити процес отримання оціночних приблизних даних про коефіцієнти теплопровідності композиційних матеріалів, що розробляються. Однак на практиці теплопровідність композиту при одній і

тій же концентрації наповнювача може змінюватись у великих межах. Це пов'язано з особливостями розподілу наповнювача у матриці. Особливо ця залежність проявляється при великій різниці коефіцієнтів теплопровідності матриці та наповнювача. Крім того, в тих випадках, коли потрібно виконання розрахунку з можливістю зміни концентрацій частинок наповнювача в широкому діапазоні або варіювання форми та розміри частинок (одиниці мікрон, ультрамікронні або наночастинки), аналітичні лінійні моделі не можуть забезпечити достатню достовірність результатів.

У цій ситуації найбільш надійним методом (крім експериментального) визначення ефективної теплопровідності нових поліімідних матеріалів є метод прямого моделювання, тобто чисельний метод розрахунку ефективного коефіцієнта теплопровідності поліімідного композитного матеріалу з урахуванням граничних і початкових умов за допомогою застосування стандартного програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS.

Використання чисельних методів для знаходження ефективної теплопровідності композиційної системи дозволяє проводити більш точні розрахунки для різних розподілів наповнювача в матриці, що дозволяє врахувати вплив структури на теплові властивості композиту, а також наявність граничного шару.

Таким чином метою кваліфікаційної роботи є програма «Теплопровідність поліімідного композиту» за аналітичною моделлю Бургера та моделлю перколяції та інструкція щодо її застосування. Інструкція щодо застосування програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS для визначення ефективної теплопровідності нових поліімідних матеріалів за методом прямого моделювання. Робота виконана відповідно до [1-2], результати опубліковані в [3-5].

1 АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ

1.1 Аналіз особливостей автоматизації процесу проектування та моделювання нових теплопровідних композитних поліімідних плівок

1.1.1 Особливості сучасних перспективних теплопровідних електроізоляційних поліімідних композитних матеріалів

Проблема відведення тепла, що виділяється під час роботи напівпровідникових приладів та пристроїв (наприклад, мікросхем, компонентів комп'ютерної техніки, світлодіодних джерел світла тощо) в останні роки стає домінуючою [6, 7]. Тепло, що виділяється, необхідно відводити в навколишній простір, в іншому випадку напівпровідникові прилади перегріваються, що різко знижує надійність їх роботи. Традиційно ця проблема вирішувалася за рахунок застосування матеріалів з високим коефіцієнтом теплопровідності (головним чином металів, їх сплавів, оксидів та нітридів).

В останні роки альтернативою застосування металів та їх сплавів як тепловідвідних елементів стали теплопровідні полімерні матеріали (ТПМ). Однак основною перешкодою при цьому є низька теплопровідність високомолекулярних матеріалів.

Для більшості полімерних матеріалів, що випускаються промисловістю, коефіцієнт теплопровідності становить (0,1–0,3) Вт/(м•К). Тобто традиційні полімерні матеріали є теплоізолюючими матеріалами, які не здатні проводити тепло. Підвищення коефіцієнтів теплопровідності та температуропровідності полімерних матеріалів можливе за рахунок модифікації властивостей базових полімерів шляхом введення мікро-, субмікро- або нанорозмірних наповнювачів з високою теплопровідністю. У якості таких наповнювачів в теперішній час використовуються порошки металів (Ag, Al, Cu, Fe та інш.), графіт, нітриди і оксиди металів [8, 9]. Застосування ТПМ дозволяє відмовитися від використання металів під час виготовлення тепловідвідних елементів конструкцій. Заміна дорогих металів теплопровідними полімерними композиціями дозволяє значно

знизити собівартість електронних приладів та пристроїв, а також суттєво зменшити їхню вагу [10]. Залежно від сфери застосування ТПМ з високою теплопровідністю повинні мати або хороші електроізоляційні властивості, або високу електропровідність. Наприклад, електроізоляційні ТПМ застосовуються як елементи теплопровідних підкладок і друкованих плат, що знаходяться під напругою, а електропровідні ТПМ – як елементи приладів та пристроїв, що підлягають заземленню в процесі експлуатації [11]. Застосування наповнювачів у вигляді різних вуглецевмісних матеріалів (графіт, технічний вуглець, вуглецеві нанотрубки) дозволяє отримати ТПМ з високою тепло- та електропровідністю [12]. З іншого боку, наповнення полімерних матриць порошками нітридів, карбідів або оксидів металів з високим коефіцієнтом теплопровідності, таких як, наприклад, AlN, SiC, ZnO і SiO₂ забезпечує хороші діелектричні властивості ТПМ разом з високою теплопровідністю [13, 14].

Розробка перспективних технологій створення полімерно-неорганічних нанокompatитних матеріалів - одна з областей сучасного матеріалознавства, що найбільш динамічно розвиваються. Заміна традиційних полімерних матеріалів композитами на основі тих же полімерів, що наповнені різними наночастинками (НЧ), дозволяє досягти суттєвого підвищення рівня властивостей матеріалів - підвищити механічну міцність та жорсткість матеріалу, термостійкість, покращити низку інших властивостей. Теплопровідні полімерні композиційні матеріали, що містять неорганічні наповнювачі широко застосовуються в електро- та теплотехніці, електроніці. Композиційні матеріали, як правило, отримують шляхом механічного або ультразвукового змішування полімеру та наповнювача, що пройшов попередню обробку органомодифікуючими сполуками для надання йому органофільних властивостей.

Серед полімерних композиційних матеріалів поліімідні матеріали, незважаючи на відносну високу вартість, займають одне з лідируючих місць завдяки термостійкості та високим показникам міцності, тому розробка нових композиційних матеріалів на основі поліімідних зв'язуючих завжди буде викликати відчутний науковий і промисловий інтерес. На сьогоднішній день поліімідні матеріали мають широкий спектр можливих застосувань як матеріали,

що тривало працюють у вузлах машин та приладів, а також як ізоляційні покриття. Поліімідні матеріали можуть бути використані при температурах $(+250 \div +500)^\circ\text{C}$ (залежно від часу та навколишнього середовища), при криогенних температурах, при впливі проникаючої радіації з поглиненими дозами до 10^4 Мрад і більше, при високих механічних навантаженнях та при поєднанні цих умов. Вони ефективно застосовуються в електротехніці та радіоелектроніці, авіаційній, ракетно-космічній та інших галузях промисловості, оскільки можуть суттєво знизити вагу та габарити виробів, підвищити їх надійність, питому потужність та робочу температуру. Аналіз науково-технічних даних та практичних робіт з розробок термостійких полімерних матеріалів, зокрема, поліімідів, показав перспективність використання термопластичних поліамідокислот (ПАК) та лаків, на основі яких одержують вільні поліімідні (ПІ) плівки з використанням мономерів різної хімічної будови.

Однак безперервно зростаючі вимоги до матеріалів призводять до необхідності розширення типового асортименту плівок, що випускаються, і створення нових видів поліімідних систем зі спеціальними властивостями, у тому числі з високими електроізоляційними і, в той же час, теплопровідними характеристиками [15].

Таким чином, метою теоретичної роботи є проведення пошуку та аналізу даних та результатів теоретичних і експериментальних досліджень, літературних джерел та патентів у галузі поліімідних композиційних матеріалів. Узагальнення отриманих даних та рекомендацій щодо створення нових перспективних теплопровідних електроізоляційних поліімідних матеріалів, у тому числі в гнучких поліімідних лакофольгових шаруватих матеріалах.

Особливо пошуку рекомендацій, що перевірені на практиці щодо створення композитних поліімідних плівок із суттєво збільшеною теплопровідністю від типових значень $0,12 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ до $5 \div 10 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$, що дозволяють їх використання також як термоінтерфейси для комутуючих плат та кабелів у різних радіоелектронних пристроях. У тому числі у приймачах детекторів електромагнітних випромінювань, у світлодіодних джерелах світла та

сонячних модулях як космічного, так і наземного застосування, для забезпечення оптимальних теплових режимів.

1.1.2 Композити на основі полімерних матриць та методи їх отримання

Ненаповнені полімери, як було зазначено раніше, у їх природному стані є утеплювачами, теплопровідність яких становить $0,1 \div 0,3$ Вт/(м•К). Низько та середньо наповнені полімери мають теплопровідність $0,3 \div 2$ Вт/(м•К), що є недостатнім значенням ефективного розсіювання тепла, необхідного для багатьох технічних застосувань. Основна відмінність між низько-, середньо- та високо наповненими системами полягає в механізмі перенесення тепла. У низько- та середньо наповнених системах наповнювачі мікронного розміру не створюють безперервних шляхів для теплового потоку, так що передача тепла в таких композитах визначається, головним чином, полімерною матрицею. У високо наповнених системах частинки пов'язані одна з одною, створюючи безперервну сітку, через структуру якої здійснюється передача тепла.

Основна ідея ефективного управління теплофізичними характеристиками композитного матеріалу при високих ступенях наповнення полягає у максимізації теплопровідних шляхів поряд з мінімізацією граничного теплового опору наповнювач-наповнювач і наповнювач-матриця.

Високонаповнені (> 50 об. %) полімерні композити можуть мати теплопровідність до 32 Вт/(м•К), і, отже, можуть бути ефективними, з практичної точки зору, теплопровідними матеріалами [7, 16, 17].

Схематичне зображення залежності теплопровідності полімерних композитів від вмісту наповнювача наводиться на рис. 1.1 [17].

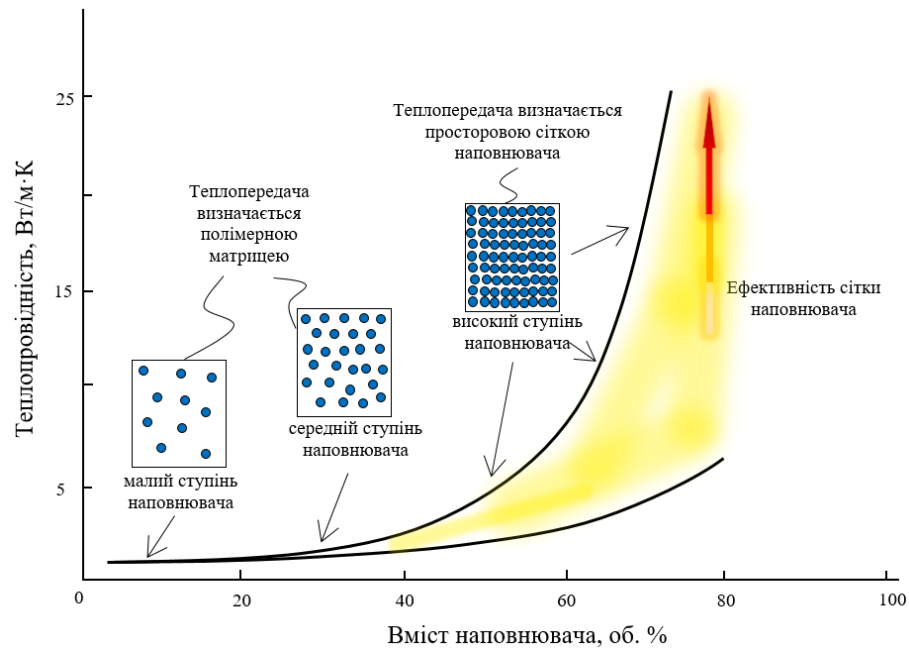


Рисунок 1.1 – Схематична залежність теплопровідності полімерних композитів від вмісту наповнювача

Якщо здатність твердих тіл проводити тепло пов'язана з їхньою структурою, складом та в основному характеризується коефіцієнтом теплопровідності, то розсіювання тепла відбувається на межі розділу фаз повітря – тверде тіло. Закони теплопередачі в режимі так званої природної конвекції такі, що є деяка конкретна межа кількості тепла, яка може бути поглинена з одиниці поверхні, що тепло віддає навколишньому повітрю. Ця кількість тепла не залежить від теплопровідності матеріалу, що віддає тепло (чи то деревина, метал, пластмаса або папір). Для охолодження в цілому це означає, що підвищення коефіцієнта теплопровідності має сенс лише до того моменту, поки кількість тепла, що транспортується через тіло, не досягне значення, яке може бути максимально прийнято (розсіяно) повітрям на останньому етапі, що лімітує. Відповідно до розрахунків, «ефективно» працююча величина коефіцієнта теплопровідності коливається в районі $5 \div 10$ Вт/(м·К). Подальше збільшення вже надмірно і не призводить до збільшення теплотнімання загалом (рис. 1.2) [7].

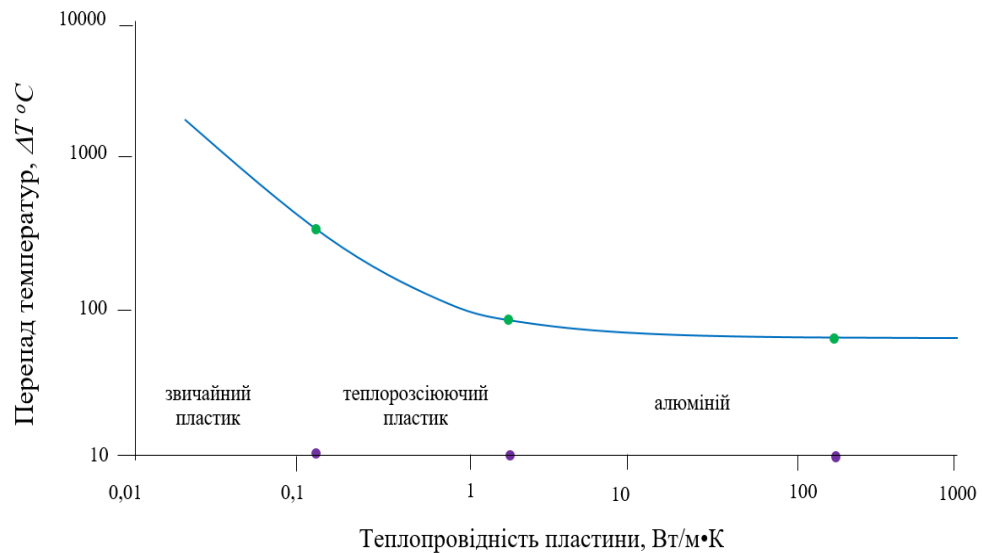


Рисунок 1.2 – Вплив теплопровідності матеріалів пластин із різною теплопровідністю на нерівномірність її температурного поля

Тим самим було підтверджено, що теплопровідний потенціал міді, алюмінію та інших високотеплопровідних дорогих матеріалів використовується в режимі природного охолодження у кращому випадку лише на одну десяту своїх можливостей, а їх застосування є технічно надмірним. Саме корпуси, монтажні плати та інші численні деталі з полімерів є по суті об'єднуючим, інтегруючим середовищем для взаємодії тепловиділяючих радіоелектронних та інших функціональних елементів. Тому зрозуміло прагнення розробників використовувати більш дешеві полімери, у тому числі полііміди, для охолодження електронних пристроїв.

Глибина впливу наповнювача на властивості матеріалу зростає по мірі збільшення концентрації частинок в матриці. Однак на практиці такі концентрації, особливо наночастинок, вдається варіювати в досить вузьких межах: зазвичай концентрації наночастинок, що вводяться в полімер, складають одиниці відсотків. В силу високої поверхневої активності наночастинок вони характеризуються вираженою тенденцією до агрегації та агломерації з утворенням кластерів, стопок (наношари) та пачок-джгутів (частки циліндричної форми) окремих наночастинок. Утворення таких агрегатів призводить до

гетерогенізації структури матеріалу та різкого зниження ефективності впливу нанонаповнювача на його властивості.

Відповідно, найважливішим етапом будь-яких технологій виготовлення нанокompозитних матеріалів є процес введення частинок наповнювача в об'єм матричного полімеру та їх змішування. Завданням, яке необхідно вирішити при організації цього процесу, є забезпечення однорідного розподілу частинок, які вносяться в об'єм матриці. Від того, наскільки успішно вирішено це завдання, залежить гранична концентрація наповнювача, яку вдається створити у композитному матеріалі без втрати позитивного ефекту.

1.1.3 Матеріали порошків для створення електроізолюючих теплопровідних поліімідних композиційних матеріалів.

Для отримання поліімідних композиційних плівок з регульованими фізико-механічними та теплофізичними характеристиками необхідно до сполучного додавати дисперсний наповнювач.

Відповідно до класифікації [18] дисперсні наповнювачі за розміром частинок d діляться на :

- великодисперсні (d більше 40 мкм);
- середньодисперсні (d від 10 до 40 мкм);
- високодисперсні (d від 1 до 10 мкм);
- ультрадисперсні (d менше 1 мкм).

До цієї класифікації додалася група порошків нанодисперсних (d менше 0,1 мкм). Для підвищення теплопровідності полімерних матеріалів при збереженні необхідних їх властивостей, у тому числі високих електроізоляційних характеристик, найчастіше при створенні полімерних композитів і нанокompозитів використовуються мікро і наночастинки таких широко відомих і застосовуваних у промисловому виробництві діелектричних теплопровідних матеріалів, таких як BN, AlN, TiO₂ и Al₂O₃, SiO₂, SiC (табл. 1.1).

Таблиця 1.1 – Теплопровідність наповнювачів

№ п/п	Тип наповнювача (монокристали)	Коефіцієнт теплопровідності, Вт/м•К
1	Нітрид бору (BN)	180
2	Нітрид алюмінію (AlN)	285
3	Оксид алюмінію (Al ₂ O ₃)	20
4	Діоксид титану (TiO ₂)	7-8
5	Діоксид кремнію (SiO ₂)	11-14
6	Карбід кремнію (SiC)	300-490

Для структурного моделювання та розрахунку ефективної теплопровідності нових ПІ композиційних плівок зазвичай вибирають розмір частинок наповнювачів, що належать до групи високодисперсних та нанодисперсних порошків.

Практична можливість суттєвого збільшення теплопровідності електроізоляційних полімерних композитних матеріалів, у тому числі поліімідів, при введенні їх в об'єм як наповнювачів діелектричних теплопровідних матеріалів підтверджується наведеними нижче прикладами:

– у роботі [19] досліджували теоретичними та експериментальними методами теплопровідність полімерних нанокompозитів, що містять гексагональний нітрид бору (ГНБ). При невпорядкованому розташуванні 6,3 об. % ГНБ підвищення теплопровідності становило 300 %. При цьому орієнтування, функціоналізація чи покриття даних частинок поліімідом (ПГНБ) сприяє ще більшому підвищенню теплопровідності. Полімерні композиційні матеріали (ПКМ), що містять 60 об. % частинок ПГНБ, мають теплопровідність 3,3 Вт/(м•К), у той час як без покриття 2,6 Вт/(м•К);

– у роботі [20] повідомляється, що теплопровідність композиційного матеріалу, що містить 50 об. % необробленого нітриду алюмінію (AlN) становила 1,25 Вт/(м•К);

– у роботі [21] представлені результати досліджень впливу розмірів та геометрії частинок змішаних наповнювачів різних складів на термічні та механічні властивості гібридних композитних систем. Вивчено вплив системи, що складається з полігональних частинок Al_2O_3 та пластин нітриду бору (НБ), на теплопровідність ПКМ. ПКМ, що містить 30 об. % гібридного наповнювача Al_2O_3 +НБ (1 мкм), мав значно більшу теплопровідність (0,57 Вт/(м•К)), ніж наповнений;

- у роботі [22] вивчені теплофізичні властивості поліімідних плівок із наповнювачем частинок нітриду бору та частинок TiO_2 з розмірами частинок до 10 мкм.

Теплопровідність плівок ПІ + нітрид бору (40 мас. %) склала 1,24 Вт/(м•К), а теплопровідність плівок ПІ+ TiO_2 склала близько 1,12 Вт/(м•К).

1.1.4 Основні поняття теплопровідності

Теплопровідність є процесом переносу енергії. Як і інші процеси перенесення у твердому тілі, теплопровідність має релаксаційний характер. Основними механізмами переносу теплової енергії у твердих тілах є електронний механізм переносу та фононний. Електронний механізм перенесення тепла (електронна теплопровідність λ_e), який обумовлений вільними електронами, відіграє домінуючу роль металах. Фононний механізм, тобто. передача теплоти коливаннями кристалічних ґрат (фононна або ґраткова теплопровідність λ_p), характерний для діелектриків. У простих металах теплова енергія переноситься як фононами, і електронами. Слід зазначити, що фононний механізм переносу теплової енергії відіграє незначну роль. Наприклад, у чистих металах фононний внесок у загальну теплопровідність становить 1 – 2%.

Під теплопровідністю твердого тіла розуміють процес поширення тепла від нагрітих частин тіла до менш нагрітих, що призводить до вирівнювання температур. Основний закон теплопровідності – закон Фур'є:

$$\vec{q} = -\lambda \cdot \nabla T \quad (1.1)$$

де q - вектор щільності теплового потоку (чисельно рівний енергії, що проходить через поперечний переріз зразка за одиницю часу);

λ – коефіцієнт теплопровідності, Вт/(м•К).

Рівняння (1.1) свідчить про те, що потік тепла пропорційний градієнту температури ∇T (знак «мінус» вказує на те, що потік тепла спрямований протилежно градієнту температури, тобто тепло поширюється від гарячої області до холодної).

У разі нестационарних станів перенесення тепла описується диференціальним законом Фур'є:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \cdot \nabla^2 \cdot T + \frac{q}{C_p \cdot \rho} \quad (1.2)$$

де C_p – питома теплоємність;

ρ – густина; q – потоку тепла; τ – час;

Коефіцієнт $a = \lambda / C_p$ характеризує швидкість поширення тепла в речовині та називається коефіцієнтом температуропровідності [23].

1.1.5 Теоретичні моделі теплопровідності

Теплопровідність полімерів визначається ґратовими коливаннями сітки полімеру. Для опису теплопровідності полімерів у твердому агрегатному стані (кристалічному або склоподібному) використовують основні положення фононної теорії, розробленої для твердих тіл. Полімери зазвичай відносяться до класу матеріалів з низькою теплопровідністю (0,1-0,45 Вт/м•К). Введення наповнювачів у полімерну матрицю може значно змінювати процеси теплоперенесення. Для їх опису необхідно знати залежність ефективної теплопровідності наповненого полімеру від орієнтації, геометрії, фізико-хімічних особливостей взаємодії, теплофізичних параметрів, концентрації та розподілу компонентів, що входять до композиції.

Відомо, що практично всі спроби пояснення протікання теплового потоку полімерної матриці, що містить теплопровідні частинки, зводяться до теорії перколяції (протікання), згідно з якою теплопровідність залежить від об'ємної частки теплопровідного наповнювача. Найбільш перспективним є використання високонаповнених ПКМ (більше 40–50 %), які мають високий рівень теплопровідності.

Головним завданням при створенні полімерної теплопровідної композиції є забезпечення безперервної ланцюжкової структури теплопровідного наповнювача в полімерній матриці, що дозволяє отримувати КМ з теплопровідністю, що змінюється в широкому інтервалі - від значень, характерних для діелектриків, до значень, що дозволяють використовувати їх як теплопровід.

Утворення теплопровідних шляхів у двофазній системі залежить від здатності частинок теплопровідної фази утворювати хороший тепловий контакт при зіткненні або зближенні.

Основний недолік такої системи полягає в тому, що теплопровідні частинки ізольовані один від одного і, таким чином, не вносять необхідного вкладу в наскрізну теплопровідність композиту, якщо їх концентрація не дуже велика. При високій концентрації теплопровідних частинок (високому порозі перколяції) механічні властивості композиту різко погіршуються, і матеріал стає жорстким і крихким. Тому створення композиту, що поєднує в собі хороші механічні та теплопровідні властивості, є дуже непростим завданням.

Схематичне зображення залежності теплопровідності полімерних композитів від вмісту наповнювача (рис. 1.1). Ненаповнені полімери у природному стані є утеплювачами, теплопровідність яких, як було зазначено раніше, становить 0,1-0,45 Вт/м•К. Низько та середньо наповнені полімери мають теплопровідність 0,3-2 Вт/м•К, що є недостатнім значенням ефективного розсіювання тепла, необхідного для багатьох технічних застосувань. Основна відмінність між низько-, середньо- та високонаповненими системами полягає в механізмі перенесення тепла.

У низько- та середньонаповнених системах наповнювачі мікронного розміру не створюють безперервних шляхів для теплового потоку, так що передача тепла таких композитах визначається, головним чином, полімерною матрицею. У високонаповнених системах частинки пов'язані одна з одною, створюючи безперервну сітку, через структуру якої здійснюється передача тепла.

Основна ідея ефективного управління теплофізичними характеристиками композитного матеріалу при високих ступенях наповнення полягає у максимізації теплопровідних шляхів поряд з мінімізацією граничного теплового опору наповнювач-наповнювач і наповнювач-матриця.

Високонаповнені (>50 об. частка, %) полімерні композити можуть бути ефективними теплопровідними матеріалами. Дисперсно-наповнені полімерні композити є фононними провідниками тепла, в яких граничний тепловий опір є бар'єром для потоку тепла через різницю між фононними спектрами різних фаз і розсіювання на кордонах між різними фазами.

При аналізі характеру теплоперенесення в дисперсно-наповнених композитах слід враховувати два фактори: перенесення тепла через частинку наповнювача та перенесення тепла через перколяційний ланцюг. З одного боку, теплоперенесення через великі частинки відбувається легше, ніж через дрібні внаслідок меншої протяжності кордонів, з іншого боку, дрібні частинки, при ідентичних ступенях наповнення, розташовані ближче один до одного в композиті, що означає формування більш тонкого полімерного шару. Це дозволяє зменшити граничне теплоопір наповнювач-матриця, і, як результат, теплопередача через сітку частинок наповнювача буде більш ефективною.

Принципово структуру композиту можна класифікувати за допомогою наступних моделей:

– структура з вкрапленнями, що складається з сполучного матеріалу та замкнених включень, що не контактують, які можуть бути розподілені хаотично або впорядковано;

– структура із взаємопроникними компонентами з безперервністю протяжності речовини будь-якого компонента у всіх напрямках.

Найбільш поширеним методом теоретичного дослідження теплопровідності гетерогенних систем є метод узагальненої провідності, заснований на аналогії між диференціальними рівняннями стаціонарного теплового потоку, електричного струму, дифузії, діелектричної проникності, магнітної сприйнятливості та ін. Теорія узагальненої провідності дає хороші результати, якщо враховуються реальна структура матеріалу, пористість системи, розміри частинок та пор, способи контактування частинок, вплив кондуктивної та радіаційної складових на ефективну теплопровідність системи. Тому для передбачення теплових властивостей композитів розвинуто ряд емпіричних моделей, в яких розглядаються двофазні системи.

Відповідно до [23, 24] вихідними даними для теоретичного моделювання ефективної теплопровідності ПКМ є: теплопровідність компонентів, розміри і форма частинок, шорсткість поверхні твердих частинок, щільність, площа контакту частинок, тепловий опір контакту, температура, вологість та ін.

Експериментами виявлено наступні залежності теплопровідності КПКМ від характеристик компонентів:

– значення теплопровідності ПКМ, середовище якого є безперервним (повітря/зв'язуюче) у будь-якому напрямку та переривчастість твердої фази наповнювача.

– більшою мірою визначається теплопровідністю середовища [24, 25];

– на теплопровідність ПКМ істотно впливають такі характеристики структури матеріалу, як: частка наповнювача (частки) та пов'язані з нею щільність і пористість, розмір і форма частинок наповнювача, перервність/безперервність фази кожної компонента;

– контакт між частинками чи безперервність цієї фази суттєво посилює вплив теплопровідності частинок на теплопровідність ПКМ [24, 25];

– зі збільшенням частки компонента у ПКМ його вплив на теплопровідність збільшується. У двох компонентному ПКМ, у якому сполучною є повітря, а наповнювачем тверді частинки, такий вплив проявляється

в монотонному зростанні теплопровідності ПКМ зі зменшенням пористості або збільшенням його густини [25];

- залежність теплопровідності ПКМ від температури визначається температурною залежністю теплопровідності компонентів та обсягом пористості та розміром пор. При температурі понад 0 °С теплопровідність ПКМ зазвичай зменшується, а аморфних середовищ – зростає;

- перенесення тепла в ПКМ з наповнювачем з частинок розміром менше 1 мм і при температурі нижче 100 °С визначається кондуктивною теплопровідністю, а конвективне перенесення тепла незначне [25];

- ефективна теплопровідність ПКМ зростає із збільшенням вологи у повітряному середовищі [24, 25];

- теплопровідність ПКМ з дрібнодисперсним матеріалом нижча, ніж з великодисперсним. Це пов'язано з тим, що при малих розмірах пір даються ознаки неповноти обміну енергії, а зі збільшенням розміру пір можливе зростання вкладу вільної конвекції у перенесення тепла [24, 25].

При розрахунку ефективної теплопровідності поліімідної композиційної плівки розглядаються умови (температура, середовище та ін.), за яких основний механізм передачі тепла - теплопровідність, а внесок випромінювання та конвективного теплообміну дуже малий. Отже, завдання дослідження полягає у визначенні основного показника якості теплопровідних поліімідних плівок - теплопровідності, за відомими значеннями теплопровідності його компонентів (сполучного та наповнювача). З погляду прогнозування такого найважливішого показника якості, як теплопровідність ПКМ, важливо переконатися в адекватності різних моделей на сукупності експериментальних даних, які включають такі змінні: матеріал наповнювача та сполучного, частка наповнювача у композиційному матеріалі.

Основні формули для розрахунку теплопровідності наведені нижче:

Формула Бургера (для сферичних частинок) [25]:

$$\lambda_{\text{эф}} = \frac{V_{\text{св}} \lambda_{\text{св}} + CV_{\text{н}} \lambda_{\text{н}}}{V_{\text{св}} + CV_{\text{н}}} \quad (1.3)$$

Безрозмірний коефіцієнт C залежить, по-перше, від характеристик розподілу фаз у суміші: $C = 1$ – гомогенна суміш $C \ll 1$ – ізольована фаза наповнювача, $C > 1$ – безперервна фаза наповнювача. По-друге, від відношення $\lambda_{\text{н}}/\lambda_{\text{св}}$ (чим більше це відношення, тим менший коефіцієнт C).

Формула Максвелла [26]:

$$\lambda_{\text{эф}} = \lambda_{\text{св}} \left(\frac{\lambda_{\text{н}} + 2\lambda_{\text{св}} - 2V_{\text{н}}(\lambda_{\text{св}} - \lambda_{\text{н}})}{\lambda_{\text{н}} + 2\lambda_{\text{св}} + V_{\text{н}}(\lambda_{\text{св}} - \lambda_{\text{н}})} \right) \quad (1.4)$$

Формула Максвелла-Бургера-Эйкена [26]:

$$\lambda_{\text{эф}} = \lambda_{\text{св}} \left(\frac{1 - \left(1 - \frac{\lambda_{\text{н}}}{\lambda_{\text{св}}}\right) LV_{\text{н}}}{1 + (L-1)V_{\text{св}}} \right) \quad (1.5)$$

де $L = 3\lambda_{\text{св}}/(2\lambda_{\text{св}} + \lambda_{\text{н}})$ – сферичні частинки;

$L = (5\lambda_{\text{св}} + \lambda_{\text{н}})/3(\lambda_{\text{св}} + \lambda_{\text{н}})$ – циліндричні частинки;

$L = (\lambda_{\text{св}} + 2\lambda_{\text{н}})/3\lambda_{\text{св}}$ – тонкі пластини.

Формула Дульнева (для комірки з ізотермічними межами) [24]:

$$\lambda_{\text{эф}} = \lambda_{\text{св}} \left(\frac{1 + \left(\frac{\lambda_{\text{н}}}{\lambda_{\text{св}}} - 1\right) V_{\text{н}}^{\frac{2}{3}}}{1 + \left(\frac{\lambda_{\text{н}}}{\lambda_{\text{св}}} - 1\right) V_{\text{н}}^{\frac{2}{3}} \left(1 - V_{\text{н}}^{\frac{1}{3}}\right)} \right) \quad (1.6)$$

Формула Оделевского [24] (для кубічних замкннутих включень):

$$\lambda_{эф} = \lambda_{св} \left(1 - \frac{V_n}{\frac{1}{1 - \frac{\lambda_n}{\lambda_{св}}} - \frac{1 - V_n}{3}} \right) \quad (1.7)$$

В формулах (1.3)–(1.7) прийняті такі позначення: V_n – об'ємна частка наповнювача; $V_{св}$ – об'ємна частка сполучного; λ_n , $\lambda_{св}$ и $\lambda_{эф}$ теплопровідності наповнювача, сполучного та ефективна теплопровідність суміші відповідно. Під визначенням "сполучна" розуміється безперервна фаза, а під "наповнювачем" – переривчаста. Розрахункові моделі (1.3)–(1.7) враховують теплопровідність та об'ємний вміст компонентів функціональних матеріалів.

Розрахунковим моделям притаманні суттєві спрощення, оскільки розробка більш детальних моделей перенесення тепла в гетерогенних матеріалах призводить до серйозного ускладнення розрахункових формул, але, як правило, не позбавляє необхідності введення припущень та емпіричних коефіцієнтів. Цим в основному і пояснюються експериментальні дослідження нових композицій, що продовжуються, так само як і пошук коректних моделей опису їх властивостей.

У роботі [27] показана можливість застосування лінійних моделей для наближених оцінок ефективної теплопровідності двох та трикомпонентних сумішей для широкого діапазону вмісту порошкових наповнювачів. Це дозволяє для практичних оцінок використовувати прості розрахункові моделі, наприклад формулу Бургера (1.3) для сферичних частинок.

Наявність коефіцієнта C у формулі Бургера робить її зручною для опису теплопровідності двох компонентних ПКМ. Величина цього коефіцієнту враховує такі характеристики матеріалу, як безперервність/переривчастість фаз кожної з компонентів, форму та розмір частинок наповнювача та відношення їх коефіцієнтів теплопровідності. Саме в цьому полягає його фізичне значення. У

роботі [27] зроблено висновок про суттєвий вплив твердої фази на теплопровідність ПКМ та підтверджується факт узгодження експериментальних даних з розрахунками за формулою Бургера (1.3) при значенні коефіцієнта $C > 1$. Оскільки коефіцієнт C стоїть при доданку, який враховує теплопровідність твердих частинок, то більші значення C відповідають збільшенню вкладу твердої фази в теплопровідність суміші, а менші його зниження. Ці моделі ґрунтуються на «парціальних» вкладах сполучного та хаотично впроваджених у нього частинок наповнювача.

Однак експерименти показують, що істотну роль у процесі теплоперенесення в композитах відіграють не тільки властивості та відносний вміст компонентів, але й:

- агрегація частинок наповнювача, що призводить, при досягненні концентрацій певного порогового значення, до встановлення провідних «містків» між частинками та виникнення ефекту стрибкової провідності;
- модифікація фізичних властивостей поліміду на межі розділу, внаслідок взаємодії сполучного з поверхнею частинок наповнювача;
- розпушування сполучного, що визначає наявність у композиції третього компонента - пір.

Необхідно відзначити, що практично всі моделі, які запропоновані для опису теплових та транспортних властивостей поліімідних композитів, засновані на тих чи інших спрощеннях та припущеннях. Наприклад, оцінка теплопровідності полімерних композитів часто проводиться у припущенні, що розподіл частинок наповнювача полімерної матриці є однорідним. Крім цього, передбачається, що частинки наповнювача мають правильну геометричну форму і розташовані в матриці періодично. Очевидно, що такий підхід дає здебільшого погану згоду з експериментальними даними. Крім того використання моделей ізольованих частинок для розрахунку теплопровідності не зовсім коректно, так як не враховується перколяційна складова теплопровідності.

Одним з основних понять теорії перколяції є кластер, що є ланцюжком пов'язаних об'єктів або зв'язків. Кластер, що з'єднує дві протилежні сторони системи, називається перколяційним або нескінченним кластером. Вивчення

властивостей кластера, що з'єднує, - ще одне із завдань теорії перколяції. Очевидно, що нижче за поріг перколяції можуть існувати тільки кластери кінцевого розміру.

Відповідно до класичної теорії перколяції залежність теплопровідності композиту від об'ємної частки наповнювача може бути представлена як:

$$\lambda = \lambda_2 \cdot \left(\frac{\lambda_c}{\lambda_2} \right)^{\left[\frac{1-\nu}{1-\nu_c} \right]^n} \quad (1.8)$$

де λ_c – теплопровідність композиту при $\nu = \nu_c$, а перколяційна експонента n залежить від розміру, геометричної форми та розподілу наповнювача в поліімідній матриці;

λ_2 - коефіцієнт теплопровідності диспергованої фази;

λ – ефективна теплопровідність гетерогенної системи.

Таким чином, теплопровідність високонаповненого (> 50 об. %) полімерного композиту можна обчислити, знаючи значення перколяційної експоненти n , теплопровідності наповнювача λ_2 і критичний об'єм наповнювача ν_c , при якому система знаходиться на порозі перколяції і має при цьому середню теплопровідність λ_c .

Поріг перколяції (теплопротікання) для теплопровідності в композиті визначається за такою формулою:

$$\lambda^* = \lambda_f \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_f} \right)^S \quad (1.9)$$

де $S = 2/3$ при $\lambda_m/\lambda_f \ll 1$; λ_m - теплопровідність матриці;

λ_f - теплопровідність наповнювача;

$\lambda^* = \lambda_c$, де λ_c - порогова теплопровідність композита при ν_c – критичному об'ємі наповнювача.

Розрахунок значення порога перколяції дозволяє отримати оцінку нижнього значення критичного індексу нелінійної ефективної провідності композиту, тобто показує, що в композитах є перколяційна складова [28].

У свою чергу сучасні вже існуючі обчислювальні засоби також дозволяють проводити пряме моделювання теплопровідності середовищ зі складною структурою з можливістю зміни концентрацій частинок наповнювача в широкому діапазоні або варіювання форми і розміру частинок. При цьому можна використовувати такі стандартні пакети як ANSYS, FLUENT, програмного комплексу SOLIDWORKS SIMULATION, програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS та ін. для теплофізичних та пов'язаних з ними завдань. Зазначені особливості пакету дозволяють удосконалити розрахункові моделі, наприклад, додати модуль розрахунку ефективної теплопровідності тонких поліімідних композиційних теплопровідних плівок.

1.1.6 Особливості автоматизованого програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS та навички роботи з ним

Програмний комплекс Comsol Multiphysics – потужне програмне забезпечення для моделювання, що дозволяє проектувати, аналізувати та оптимізувати мультифізичні системи. Він надає розширені можливості вирішення широкого кола мультифізичних завдань. За допомогою Comsol Multiphysics інженери та вчені можуть швидко та точно моделювати та аналізувати фізичні моделі, такі як теплопередача, потік рідини, електромагнетизм, будівельна механіка, акустика та хімічні реакції. Програмне забезпечення включає зручний графічний інтерфейс користувача, а також мову моделювання на основі рівнянь [29].

Comsol Multiphysics має широкий набір інструментів для моделювання та аналізу теплових систем. Його можна використовувати для моделювання широкого спектра теплових явищ, таких як теплопровідність, конвекція, випромінювання та теплопередача через властивості матеріалів. Програмне забезпечення також надає інструменти для оптимізації теплопередачі, такі як оптимізація теплової конструкції, які можна використовувати для зниження

теплових втрат та підвищення ефективності системи. Крім того, Comsol Multiphysics включає набір теплових форм, які можна використовувати для розрахунку розподілу температури в системі.

Інструмент Comsol Multiphysics можна використовувати для точного розрахунку теплопровідності матеріалу. Теплопровідність є мірою того, як добре матеріал проводить тепло, і важлива для прогнозування теплопередачі в системі. Він також може використовуватися для розрахунку теплового опору матеріалу, який є мірою опору матеріалу потоку тепла. Також його можна використовувати для розрахунку коефіцієнта теплопровідності матеріалу, який є мірою того, як швидко тепло передається через матеріал.

Comsol Multiphysics можна також використовувати для моделювання та аналізу теплопередачі через об'єкти складної геометрії. Програмне забезпечення може використовуватися для моделювання різних завдань теплопередачі, включаючи нестационарну теплопередачу, провідність та конвекцію по трубах та повітроводах, теплове випромінювання та теплопередачу в шаруватих структурах. Програмне забезпечення включає інструмент для розрахунку відношення площі поверхні до обсягу геометрії, що важливо для прогнозування швидкості теплопередачі в системі.

Загалом Comsol Multiphysics — неймовірно потужний інструмент для моделювання та аналізу теплових систем. Його можна використовувати для точного прогнозування теплової поведінки системи та для оптимізації теплової конструкції системи. Завдяки потужному інструменту для обчислення теплових показників інженери та вчені можуть швидко та точно розрахувати теплопровідність, опір та дифузійну здатність матеріалу.

Приклад простої геометричної моделі наведено на рис. 1.3.

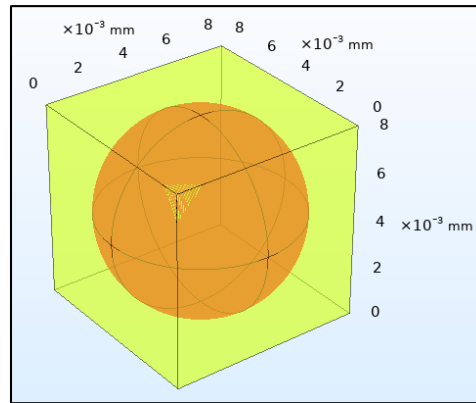


Рисунок 1.3 – Приклад простої геометричної моделі

Для побудови такої моделі використовувалися такі інструменти як Parameters , Graphics та Mesh [30].

Інструмент Parameters дозволяє задавати початкові параметри системи, до яких ми будемо слатися протягом моделювання.

Інструмент Graphics дозволяє будувати графічні моделі. У цьому розділі можна обрати всі характеристики моделі, або взяти параметри із розділу Parameters. Наприклад розміри фігури, діаметр та інші.

Інструмент Mesh у Comsol Multiphysics – це інструмент, який дозволяє створювати розрахункові сітки для моделювання фізичних явищ. Розрахункова сітка, також відома як сітка кінцевих елементів (FE), складається з безлічі маленьких елементів, які використовуються для опису поведінки матеріалу всередині моделювання.

За допомогою інструмента Mesh можна створювати сітку на моделі, задаючи різні параметри, такі як розміри елементів сітки, тип елементів, щільність сітки і т.д. Інструмент Mesh дозволяє створювати як прості, так і складні сітки, а також імпортувати сітки з інших програм.

Приклад сітки наведено на рис. 1.4.

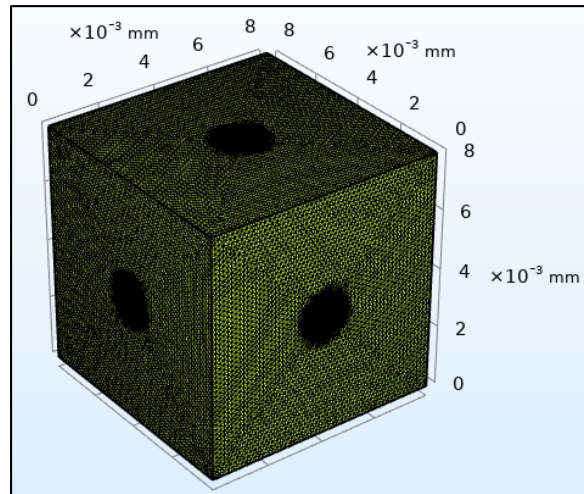


Рисунок 1.4 – Приклад використання сітки

Також за допомогою інструмента Study можна робити експерименти , наприклад подивитися тепловий потік на нашій моделі. Для цього необхідно задати параметри матеріалу нашого об'єкту в розділі Materials. Потім створити стаціонарну задачу за допомогою інструмента Study, вибрати задачу з розрахунком теплового потоку та отримати графічну модель теплового потоку, яка накладена на наш об'єкт. Приклад моделі теплового потоку наведено на рис. 1.5 [31].

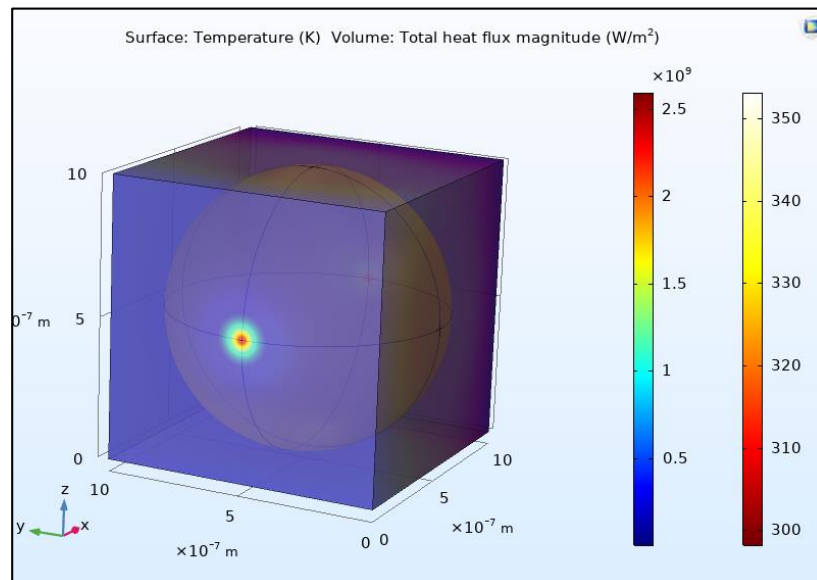


Рисунок 1.5 – Модель теплового потоку

Програмний комплекс Comsol Multiphysics надає широкий спектр інструментів для моделювання та аналізу явищ теплопередачі, таких як

провідність, конвекція, випромінювання та властивостей матеріалів. Він також містить інструменти для оптимізації теплопередачі, такі як оптимізація теплової конструкції, які можна використовувати для зменшення втрат тепла та підвищення ефективності системи. Крім того, Comsol Multiphysics містить набір теплових форм, які можна використовувати для розрахунку розподілу температури в системі. Основні інструменти програми це Parameters, Materials, Mesh, Geometry та Study. За якими можна побудувати графічну модель та робити з нею експерименти.

1.2 Висновки аналізу предметної області

Таким чином теоретична робота по аналізу особливостей автоматизації процесу проектування та моделювання нових теплопровідних композитних поліімідних плівок, що була проведена, дозволяє успішно досягти комплексну мету кваліфікаційної роботи по розробці програми «Теплопровідність поліімідного композиту» для розрахунку ефективної теплопровідності теплопровідних поліімідних композитних плівок за аналітичною моделлю Бургера та моделлю перколяції та інструкції щодо її застосування. А також провести 3D - структурне моделювання поліімідних композитних плівок і розрахунки ефективних коефіцієнтів теплопровідності III композитних плівок за допомогою програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS і розробити інструкцію щодо застосування програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS для визначення ефективної теплопровідності нових поліімідних матеріалів, що розробляються, за методом прямого моделювання.

2 СТРУКТУРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ЕФЕКТИВНОЇ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ТЕПЛОПРОВІДНИХ ПОЛІМІДНИХ КОМПОЗИТНИХ ПЛІВОК

2.1 Структурне моделювання теплопровідних поліімідних композитів

Теоретичний опис явищ перенесення (електропровідність, теплопровідність та ін.) у твердих тілах, рідких та газоподібних середовищах заснований на схожості основоположних рівнянь. Саме подібність рівнянь позначилося на теорії «узагальненої провідності». "Узагальнена провідність" поєднує властивості композитів, чутливих до їх структури. Такими властивостями є: діелектрична та магнітна проникність, теплопровідність, модуль зсуву, пружність тощо.

Значення властивостей теплопровідних композитів залежить як від об'ємної частки компонентів у ПКМ, так і від структури ПКМ та орієнтації меж розділу сполучного та наповнювача.

Аналізуючи теоретичні та експериментальні дослідження сумішей та ПКМ [18, 24, 25, 26], що містять більше однієї фази, можна висунути ряд припущень про властивості та характеристики функціональних матеріалів.

До них відносяться:

- геометрія твердих частинок - проста і правильна;
- заданий розподіл частинок наповнювача у сполучному (хаотичний/упорядкований). Це дозволяє виділити типову елементарну комірку, що характеризує матеріал взагалі;
- взаємодія фаз наповнювача та/або сполучного (ізолюваність або зв'язність);
- тепловий контакт частинок наповнювача (ідеальний чи обумовлений);
- наявність/відсутність хімічних взаємодій між наповнювачем та сполучним;

– перенесення тепла розглядається за основним механізмом теплопровідності.

Завданням структурного моделювання є розробка поліімідних композитних матеріалів, у яких можна використовувати дрібнодисперсні наповнювачі - аж до нанорозмірних частинок - і забезпечити рівномірний розподіл теплопровідного наповнювача в поліімідній матриці, що гарантує високий рівень теплопровідних, діелектричних і фізико-механічних властивостей одержуваного функціонального матеріалу.

Ще одним завданням структурного моделювання є також отримання теплопровідних електроізолюючих поліімідних композитних матеріалів (варіантів), що володіють високими теплопровідними і діелектричними властивостями за умови збереження хороших фізико-механічних властивостей навіть за надвисоких ступенів наповнення.

В роботі [32] повідомляється, що зменшення розміру частинок наповнювачів у композитному матеріалі до нанорозмірів не призводить до істотної зміни теплопровідності порівняно з матеріалами, що використовують мікронні частинки наповнювача. Зменшення розміру наночастинок менше, ніж 20 нм призводить до значного зниження значення коефіцієнта теплопровідності. При використанні мікронних і нанорозмірних частинок у суміші теплопровідність композитів збільшується. При цьому розмір мікро- і наночастинок наповнювачів у використовуваній суміші впливає на властивості композиту не так помітно, як їхнє масове співвідношення в суміші. Відношення розміру мікрочастинок до розміру d наночастинок не повинно перевищувати 1000, але й не повинно бути меншим за 100, тому що інакше не досягається оптимальний розподіл наночастинок між мікрочастинками та не утворюється достатньої кількості теплопровідних шляхів, унаслідок чого теплопровідність композиційного матеріалу падає.

На рис. 2.1 наведено структурна схема III композита з відношенням розміру мікронних частинок до розміру наночастинок при якому теплопровідність композита може збільшуватись за рахунок оптимального

розподілу наночастинок між мікронними частинками при достатній кількості теплопровідних шляхів у композиті.

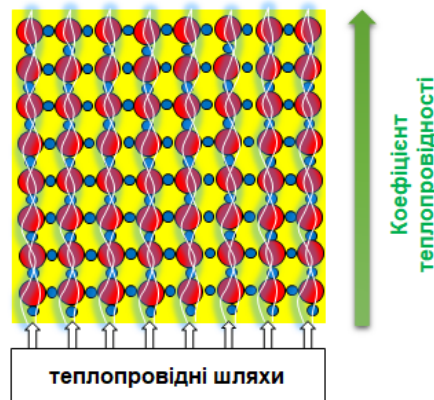


Рисунок 2.1 – Структурна схема ІІІ композиту з оптимальним розподілом наночастинок між мікронними частинками при відношенні розміру мікрочастинок до розміру наночастинок $100 < d < 1000$

Високі теплопровідні властивості досягаються за наявності часток наповнювача в композиті не менше ніж 55 мас. % і зростають за подальшого збільшення вмісту наповнювача (рис. 2.2a). Збільшення вмісту наповнювача понад 90 мас. % призводить до погіршення міцності та пластичності композитних ІІІ плівок(рис. 2.2b).

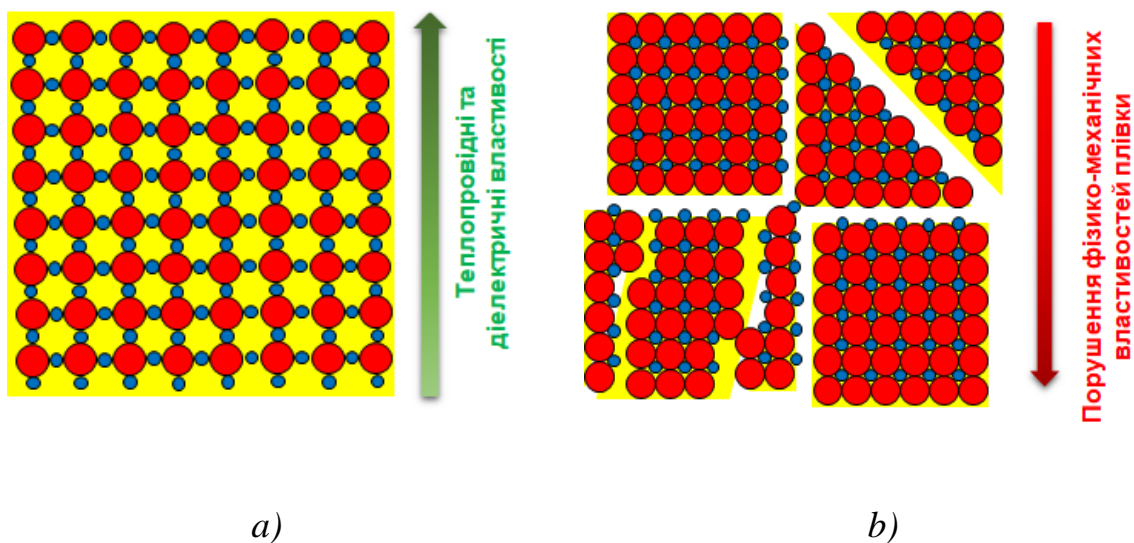


Рисунок 2.2 – Структурна схема ІІІ композиту: *a)* вміст наповнювача не менше 55 мас. %, *b)* вміст наповнювача більше 90 мас. %

2.2 Розрахункова модель теплопровідності КМ за формулою Бургера

З погляду прогнозування такого найважливішого показника якості, як теплопровідність КМ, важливо переконатися в адекватності різних моделей на сукупності експериментальних даних, що охоплюють такі основні параметри:

- матеріал наповнювача;
- матеріал сполучного;
- об’ємна частка наповнювача в композитному матеріалі.

Для наближених оцінок ефективної теплопровідності двох та трьох компонентних сумішей для широкого діапазону вмісту порошкових наповнювачів показано можливість застосування лінійних моделей [27, 33, 34]. Це дозволяє для практичних оцінок використовувати прості розрахункові моделі, наприклад формулу Бургера (1.3) для сферичних частинок. Такий підхід забезпечує високу точність результатів, зберігаючи при цьому достатню простоту і зручність в застосуванні.

Під визначенням «сполучна» розуміється безперервна фаза, а під «наповнювачем» — уривчаста. Наявність коефіцієнта C у формулі Бургера робить її зручною для опису теплопровідності двокомпонентних композитних матеріалів. Величина цього коефіцієнта враховує такі характеристики матеріалу, як безперервність/ уривчастість фаз кожного з компонентів, форму і розмір частинок наповнювача, і відношення їх коефіцієнтів теплопровідності. Саме в цьому полягає його фізичне значення. Безрозмірний коефіцієнт C залежить, по-перше, від характеристик розподілу фаз у суміші: $C = 1$ – гомогенна суміш, $C \ll 1$ – ізольована фаза наповнювача, $C > 1$ – безперервна фаза наповнювача. По-друге, від відношення $\lambda_n / \lambda_{св}$ (чим більше це відношення, тим менший коефіцієнт C) (рис. 2.3).

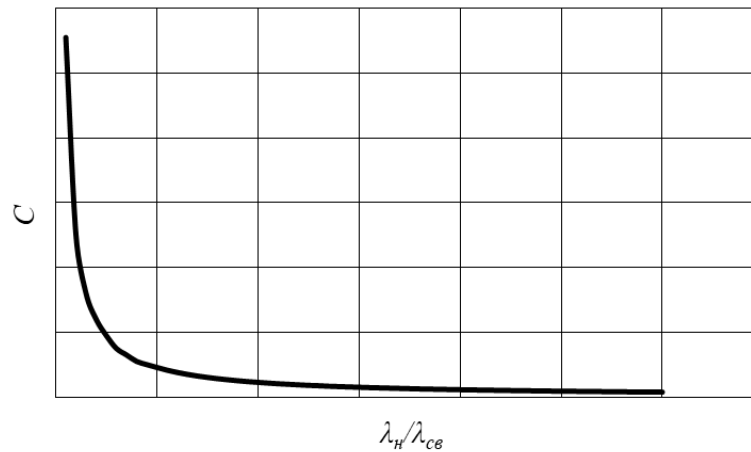


Рисунок 2.3 - Залежність коефіцієнта C у формулі Бургера від величини відношення λ_n/λ_{cv}

Для розрахунку коефіцієнта C необхідно виготовити та дослідити ефективну теплопровідність експериментального зразка поліімідних композитних плівок і розрахувати за формулою:

$$C = - \frac{\lambda_{ef} V_{cv} - V_{cv} \lambda_{cv}}{V_n \lambda_{ef} - V_n \lambda_n} \quad (2.1)$$

Недоліком формули Бургера є необхідність підбору значення коефіцієнта " C " для кожного конкретного КМ, що знижує її універсальність. Також ця модель не враховує перкаляційну складову теплопровідності.

2.3 Розрахункова модель теплопровідності КМ за моделлю перколяції (порога протікання)

Згідно з теорією перколяції, поблизу порога протікання частинки наповнювача утворюють стійкі кластери, у поверхневих шарах яких швидкості процесів перенесення вищі, ніж в об'ємі матеріалу. Унаслідок цього зближення кластерів за критичного об'єму наповнювача й утворення ними протяжної структури (так званий "нескінченний" кластер) супроводжуються швидким

посиленням явищ переносу в двофазному матеріалі. Точка перколяції відповідає концентрації наповнювача, за якої розмір зв'язного кластера досягає розміру системи. Подальше збільшення концентрації наповнювача і відхилення фази включень від стійкої кластерної структури супроводжуються зменшенням ролі меж кластерів у явищах переносу. Таким чином, виникнення особливих геометрично стійких утворень зі специфічними властивостями аналогічно утворенню фракталів у неоднорідних невпорядкованих середовищах [35].

У деяких моделях опису властивостей композиційних матеріалів поблизу порога протікання враховується стрибкоподібна зміна властивостей (електропровідність, теплопровідність тощо). Межа зміни властивостей реальної системи розмивається і проявляється як область особливої поведінки залежно від таких факторів:

- рівень неоднорідності властивостей сполучного і наповнювача;
- форма і розмір частинок і структури фази наповнювача;
- властивості компонентів (вільна енергія, поверхневий натяг, змочуваність, в'язкість, адгезія);
- ступінь агломерації частинок наповнювача при введенні його в матрицю;
- співвідношення розмірностей стійкого фрактала і зразка (умова утворення "нескінченного" кластера);
- співвідношення граничної концентрації наповнювача в сполучному і концентрації, що відповідає порогу протікання;
- технологія приготування зразка (змішування, спікання, термообробка, пресування тощо).

Коефіцієнт теплопровідності двофазного композитного матеріалу за теорією перколяції описується такою системою [36]:

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{эф}} &= \lambda_{\text{св}} (V_{\text{кр}} - V_{\text{н}})^{-s} \text{ при } V_{\text{н}} < V_{\text{кр}} \\ \lambda_{\text{эф}} &= \lambda_{\text{н}} \left(\frac{\lambda_{\text{св}}}{\lambda_{\text{н}}} \right)^v \text{ при } V_{\text{н}} = V_{\text{кр}} \\ \lambda_{\text{эф}} &= \lambda_{\text{н}} (V_{\text{н}} - V_{\text{кр}})^t \text{ при } V_{\text{н}} > V_{\text{кр}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

де $\lambda_{св}$ - коефіцієнт теплопровідності сполучного;

λ_n - коефіцієнт теплопровідності наповнювача;

$V_{кр}$ - критичний об'єм наповнювача;

V_n - об'єм наповнювача;

s, v, t - критичний індекс.

Значення критичних індексів підбираються так, щоб забезпечити:

– найкраща згода розрахункових та експериментальних величин теплопровідності за умов $V_n < V_{кр}$;

– монотонне зростання теплопровідності зі збільшенням вмісту наповнювача поблизу точки $V_{кр}$;

– співвідношення $\lambda_{еф}/\lambda_n \approx V^2$ за $V_n > V_{кр}$, що випливає з розрахункової моделі теплопровідності двофазних гетерогенних матеріалів, у яких частинки наповнювача розподілені в об'ємі матриці випадковим чином.

Недоліком моделі перколяції є необхідність підбору значень критичний індексів для кожного конкретного КМ через експериментні дані ефективної теплопровідності композитного матеріалу.

2.4 Висновки до другого розділу

Розділ 2 зосереджений на структурному моделюванні для розрахунку ефективної теплопровідності теплопровідних поліімідних композитних плівок. В ньому розглядаються основні аспекти та припущення, які впливають на властивості та характеристики цих матеріалів. Особливу увагу приділено впливу геометрії твердих частинок, розподілу частинок наповнювача, взаємодії фаз та теплового контакту на теплопровідні властивості композитів. Також обговорюються різні моделі для розрахунку теплопровідності, включаючи формулу Бургера та модель перколяції, та їх обмеження. Важливим аспектом є розробка поліімідних композитів з оптимальним розподілом наповнювачів для досягнення високих теплопровідних, діелектричних та фізико-механічних властивостей.

3 РОЗРОБКА ТА НАПИСАННЯ ПРОГРАМИ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦІЇ ПРОЦЕСУ РОЗРАХУНКУ ЕФЕКТИВНОЇ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ПОЛІІМІДНИХ КОМПОЗИТНИХ ПЛІВОК

3.1 Особливості програми

Для автоматизації розрахунків ефективної теплопровідності нових поліімідних композитних систем з використанням моделей Бургера та перколяції була написана програма «Теплопровідність поліімідного композиту $TcPC$ ». Програма написана на базі NET framework з використанням C#.

Програма дозволяє виконати наступні розрахунки:

- розрахунок ефективного коефіцієнта теплопровідності композитної плівки за моделлю Бургера та перколяції, а також побудова графіків залежності ефективної теплопровідності композитних плівок від об'ємної концентрації наповнювача;
- розрахунок та вибір коефіцієнта « C » за експериментальними даними, а також побудова графіків залежності коефіцієнта C від λ_f/λ_m ;
- розрахунок об'ємної і масової концентрації компонентів для виготовлення зразка (композиту);
- порівняння експериментальних даних (точок) із теоретичними даними та обчислення значення відхилень експериментально одержаних значень коефіцієнта теплопровідності композиційного матеріалу від теоретичних даних.
- подання інформації українською чи англійською мовами.

3.2 Архітектура

Основними частинами програми є:

- інтерфейс користувача;
- розгортання;

- логування.

Інтерфейс користувача включає:

- створення інтерфейсу користувача за допомогою Windows Forms;
- реалізація обробників подій для кнопок та інших елементів інтерфейсу;
- валідація введення даних користувачем;
- відображення даних для користувача.

Розгортання в себе включає:

- упаковку програми в інсталяційний пакет;
- визначення вимог до оточення, необхідних для запуску програми.

Логування в себе включає:

- впровадження логування для відстеження помилок та подій у додатку.

3.3 Інтерфейс користувача

Інтерфейс користувача створено за допомогою інструменту *Windows Forms*. Основне вікно програми показано на рис. 3.1.

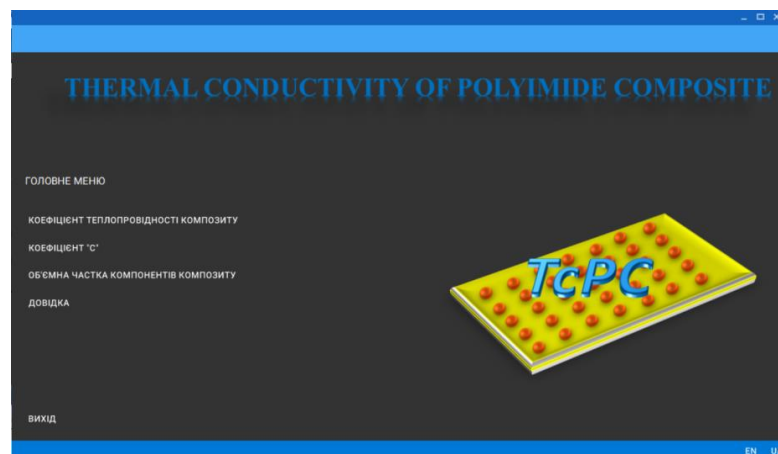


Рисунок 3.1 – Головне меню програми *TcPC*

На головному меню знаходяться основні активні кнопки переходу між вікнами програми, зміни мови інтерфейсу, довідка та вихід з програми. Приклад

коду обробника подій для активної кнопки переходу на інше вікно представлено в лістингу 3.1.

Лістинг 3.1 – Приклад коду обробника подій для активної кнопки переходу на інше вікно.

```
private void ThermalConductivityFormButton_Click(object sender, EventArgs e)
{
    SelectModelForm selectModelForm = new SelectModelForm();
    selectModelForm.OnOk += GoTo;
    GoTo(selectModelForm);
}
```

Перехід здійснюється за допомогою методу GoTo. Приклад коду методу GoTo представлено в лістингу 3.2.

Лістинг 3.2 – Приклад коду методу GoTo.

```
private void GoTo(Form form)
{
    if (form is ILocalized)
    {
        ILocalized localizedComponent = (ILocalized)form;
        _localizedComponents.Add(localizedComponent);
        form.FormClosed += (sender, e) =>
            _localizedComponents.Remove(localizedComponent);
        form.Show();
    }
}
```

Кнопка *ДОВІДКА* дозволяє переходити на сайт з докладною інструкцією щодо користування програми. Обробник цієї кнопки представлено в лістингу 3.3.

Лістинг 3.3 – Обробник кнопки *ДОВІДКА*.

```
private void HelpButton_Click(object sender, EventArgs e) =>
    Process.Start(new ProcessStartInfo(LangResource.HelpUrl));
```

Основне вікно “*Коефіцієнт теплопровідності композиту*” поділяється на два різних вікна, це модель Бургера та перколяції. Вікно вибору показано на рис. 3.2

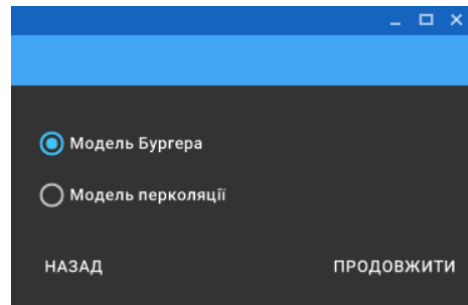


Рисунок 3.2 – Меню вибору моделей

Вікно “*Модель Бургера*” без параметрів та виводу результатів показано на рис. 3.3.

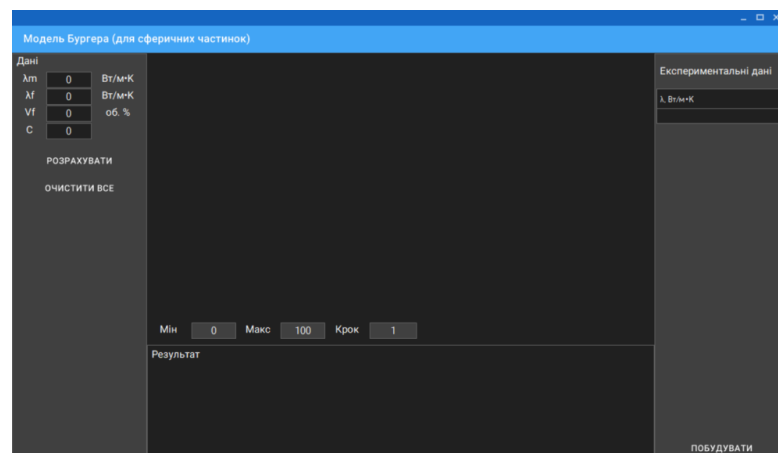
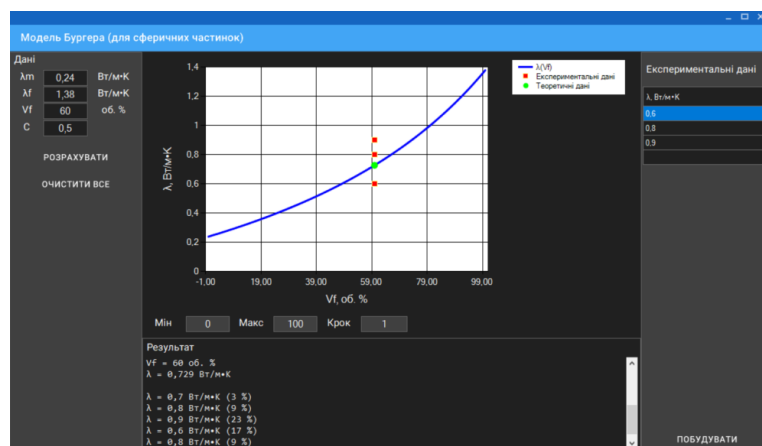


Рисунок 3.3 – Меню “Модель Бургера”

Вікно “*Модель Бургера*” з вказаними параметрами, розрахунками та виводом результатів у вигляді графіку показано на рис. 3.4.

Рисунок 3.4 – Меню “*Модель Бургера*” з усіма розрахунками та виводом графіка

Розрахунок здійснюється за допомогою активної кнопки *РОЗРАХУВАТИ* та синтаксис обробника рівняння представлено в лістингу 3.4.

Лістинг 3.4 – Приклад коду обробника кнопки *РОЗРАХУВАТИ*.

```
private void CalculateButton_Click(object sender, EventArgs e)
{
    try
    {
        double tcm = double.Parse(_tcmParamValBox.Text);
        double tcn = double.Parse(_tcnParamValBox.Text);
        double vf = double.Parse(_vnParamValBox.Text);
        double c = double.Parse(_cParamValBox.Text);
        double tc = GetValTfVal(tcm, tcn, vf, c);

        _logger.Log($"λm = { tcm } {LangResource.TcParamDim}");
        _logger.Log($"λf = { tcn } {LangResource.TcParamDim}");
        _logger.Log($"C = { c }");
        _logger.Log($"Vf = { vf } {LangResource.VParamDim}");
        _logger.Log($"λ = { Math.Round(tc, 3) } {LangResource.TcParamDim}\n");

        _chart.Series[0].Points.Clear();

        double start = _rangeSettings.Start;
        double end = _rangeSettings.End;

        if (vf >= start && vf <= end)
            _chart.Series[2].Points.AddXY(vf, tc);

        double step = (_rangeSettings.Step == 0) ? 1 : _rangeSettings.Step;

        for (vf = start; vf <= end; vf += step)
            _chart.Series[0].Points.AddXY(vf, GetValTfVal(tcm, tcn, vf, c));

        _chart.Visible = true;
    }
    catch (Exception ex)
    {
        _logger.Log(ex.Message, Color.Red);
    }
}

private double GetValTfVal(double tcm, double tcn, double Vf, double c) =>
    (((100 - Vf) * tcm) + (c * Vf * tcn)) / ((100 - Vf) + (c * Vf));
```

Графік будується за основними точками та за вказаним діапазоном, синтаксис обробника події представлено в лістингу 3.5.

Лістинг 3.5 – Приклад коду обробника побудови графіку.

```
private void BuildPointsButton_Click(object sender, EventArgs e)
{
```

```

try
{
    if (_chart.Series[2].Points.Count == 0)
    {
        _logger.Log(LangResource.NoDataAvailableComparisonMessageText,
Color.Gold);
        return;
    }
    double vf = double.Parse(_vnParamValBox.Text);
    _chart.Series[1].Points.Clear();

    var rows = _pointsDataGrid.Rows;

    for (int i = 0; i < rows.Count - 1; i++)
    {
        double tce = Convert.ToDouble(rows[i].Cells[0].Value);

        _chart.Series[1].Points.AddXY(vf, tce);

        double tcff = _chart.Series[2].Points.First().YValues[0];
        double delta = Math.Abs(((tce * 100) / tcff) - 100);
        _logger.Log($"λ = {tce} {LangResource.TcParamDim} ({(int)delta} %)");

        if (vf < _rangeSettings.Start)
            _rangeSettings.Start = vf;

        if (vf > _rangeSettings.End)
            _rangeSettings.End = vf;
    }

    _chart.Visible = true;
}
catch (Exception ex)
{
    _logger.Log(ex.Message, Color.Red);
}

```

Також на графіку виводяться теоретичні точки що розраховуються та експериментальні точки які вказує користувач.

Кнопка “ОЧИСТИТИ ВСЕ” видаляє початкові дані та очищує поля вводу та поле графіку.

Вікно “Модель перколяції” показано на рис. 3.5.

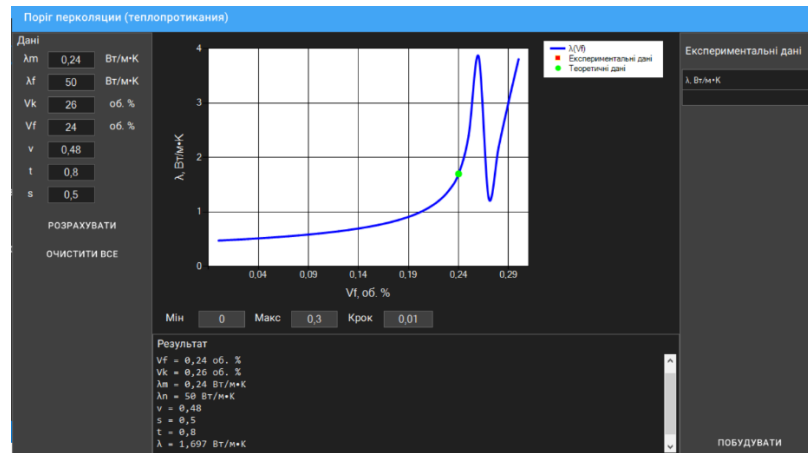


Рисунок 3.5 – Меню “Модель Перколяції” з усіма розрахунками та виводом графіка

Розрахунок виконується за допомогою класів, синтаксис розрахунку представлено в лістингу 3.6.

Лістинг 3.6 – Синтаксис розрахунку теплопровідності по моделі перколяції.

```
private double GetTcVal1(double tcm, double vk, double vf, double s) => tcm * Math.Pow(vk - vf, -s);
```

```
private double GetTcVal2(double tcn, double tcm, double v) => tcn * Math.Pow(tcm / tcn, v);
```

```
private double GetTcVal3(double tcn, double vf, double vk, double t) => tcn * Math.Pow((vf - vk), t);
```

```
private void CalculateButton_Click(object sender, EventArgs e)
{
    try
```

```
    {
        double vf = double.Parse(_vnParamValBox.Text);
        double vk = double.Parse(_vkParamValBox.Text);
        double tcm = double.Parse(_tcmParamValBox.Text);
        double tcf = double.Parse(_tcnParamValBox.Text);
        double v = double.Parse(_vParamValBox.Text);
        double s = double.Parse(_sParamValBox.Text);
        double t = double.Parse(_tParamValBox.Text);
```

```
double tc;
```

```
if (vf < vk)
{
    tc = GetTcVal1(tcm, vk, vf, s);
}
else if (vf == vk)
{
    tc = GetTcVal2(tcf, tcm, v);
```

```

    }
    else
    {
        tc = GetTcVal3(tcf, vf, vk, t);
    }

    _logger.Log($"Vf = { vf } {LangResource.VParamDim}");
    _logger.Log($"Vk = { vk } {LangResource.VParamDim}");
    _logger.Log($"λm = { tcm } {LangResource.TcParamDim}");
    _logger.Log($"λn = { tcf } {LangResource.TcParamDim}");
    _logger.Log($"v = { v }");
    _logger.Log($"s = { s }");
    _logger.Log($"t = { t }");
    _logger.Log($"λ = { Math.Round(tc, 3) } {LangResource.TcParamDim}\n");

    foreach (var series in _chart.Series)
        series.Points.Clear();

    _chart.Series[2].Points.AddXY(vf, tc);

    double start = _rangeSettings.Start;
    double end = _rangeSettings.End;

    double step = (_rangeSettings.Step == 0) ? 0.1 : _rangeSettings.Step;

    for (vf = start; vf <= end; vf += step)
    {
        vf = Math.Round(vf, 2);
        vk = Math.Round(vk, 2);

        if (vf < vk)
        {
            tc = GetTcVal1(tcm, vk, vf, s);
        }
        else if (vf == vk)
        {
            tc = GetTcVal2(tcf, tcm, v);
        }
        else
        {
            tc = GetTcVal3(tcf, vf, vk, t); ;
        }

        _chart.Series[0].Points.AddXY(vf, tc);
    }

    _chart.Visible = true;
}
catch (Exception ex)
{
    _logger.Log(ex.Message, Color.Red);
}

```

Вікно розрахунку коефіцієнту “С” також складається з панелі вводу даних, місцем виводу результатів розрахунку та графіка.

Вікно Коефіцієнт “С” показано на рисунку 3.6.

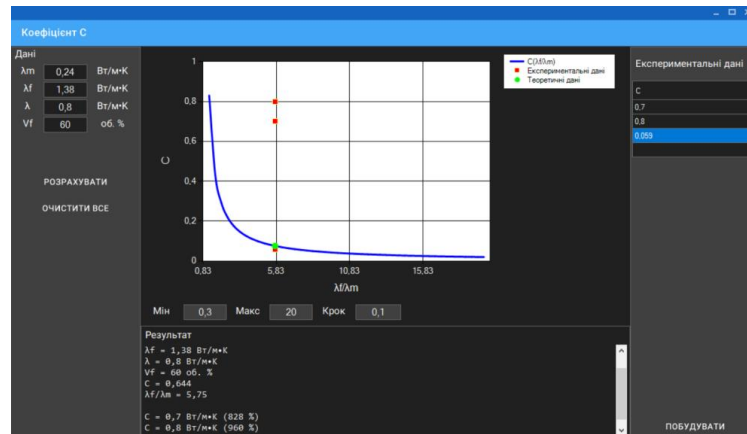


Рисунок 3.6 - Вікно Коефіцієнт “С”

Синтаксис розрахунку коефіцієнта “С” та обчислення значення відхилень експериментально отриманих значень коефіцієнта теплопровідності композиційного матеріалу від теоретично розрахованих за моделлю представлено в лістингу 3.7:

Лістинг 3.7 – Синтаксис розрахунку коефіцієнта “С” та обчислення значення відхилень експериментально отриманих значень коефіцієнта теплопровідності композиційного матеріалу від теоретично розрахованих за моделлю.

```
foreach(var series in _chart.Series)
series.Points.Clear();
double start = _rangeSettings.Start;
double end = _rangeSettings.End;
double step = (_rangeSettings.Step == 0) ? 1 : _rangeSettings.Step;
if (tcmX >= start && tcmX <= end)
_chart.Series[2].Points.AddXY(tcmX, c1);
tcf = start;
double tcVal = tcf / tcm;

while(tcVal <= end){
_chart.Series[0].Points.AddXY(tcVal, GetC1Val(tcm, tc, tcf, vf));
tcf += step;
tcVal = tcf / tcm;
_chart.Visible = true;}
```

```
catch (Exception ex){
    _logger.Log(ex.Message, Color.Red);
}
```

Побудова графіків залежності коефіцієнта C від λ_f/λ_m та перевірка на помилки здійснюються за циклом представленим в лістингу 3.8:

Лістинг 3.8 – Приклад коду циклу побудови графіку залежності коефіцієнта C від λ_f/λ_m та перевірка на помилки.

```
for (int i = 0; i < rows.Count - 1; i++)
{
    double c = Convert.ToDouble(rows[i].Cells[0].Value);
    _chart.Series[1].Points.AddXY(tc, c);

    double cT = _chart.Series[2].Points.First().YValues[0];
    double delta = Math.Abs(((c * 100) / cT) - 100);
    _logger.Log($"C = {c} {LangResource.TcParamDim} ({(int)delta} %)");

    if (tc < _rangeSettings.Start)
        _rangeSettings.Start = tc;

    if (tc > _rangeSettings.End)
        _rangeSettings.End = tc;
}
catch (Exception ex)
{
    _logger.Log(ex.Message, Color.Red);
}
```

Вікно розрахунку об'ємної частки компонентів композитів показано на рисунку 3.7.

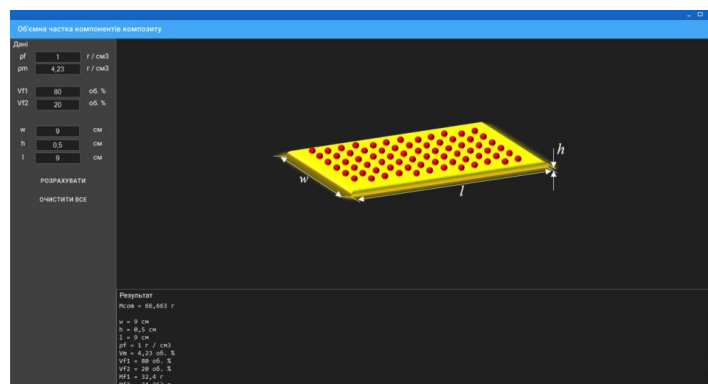


Рисунок 3.7 – Вікно “Об’ємна частка компонентів композиту”

В цьому вікні є тільки розрахунок, синтаксис якого представлений в лістингу 3.9.

Лістинг 3.9 – Приклад коду розрахунок об'ємної частки компонентів КОМПОЗИТА.

```
double width = double.Parse(_heightParamValBox.Text);
double height = double.Parse(_lengthParamValBox.Text);
double length = double.Parse(_vf2ParamValBox.Text);

double vs = width * length * height;

double dm = double.Parse(_dmParamValBox.Text);
double v1 = double.Parse(_vmParamValBox.Text);

double v2 = double.Parse(_vfParamValBox.Text);
double v3 = double.Parse(_widthParamValBox.Text);

double mn1 = vs * (v2 / 100) * dm;
double mn2 = vs * (v3 / 100) * v1;
double mm = (vs * ((100-(v2+v3))/100) * 1) / 0.125;
double mk = mm + mn1 + mn2;
```

Зберігання результатів доступне при натисканні правої клавіші мишки по полю з результатами. Є функції зберігання, копіювання та очистки. Синтаксис цієї функції представлений в лістингу 3.10.

Лістинг 3.10 – Приклад коду функції зберігання, копіювання та очистки.

```
private void ExportChartPointButton_Click(object sender, EventArgs e)
{
    _saveFileDialog.FileName = "Points";
    if (_saveFileDialog.ShowDialog() != DialogResult.OK)
        return;
    PointExporter exporter = new PointExporter()
    {
        HorizontalAxisLabel = "λf/λm",
        VerticalAxisLabel = "C";
    };
    exporter.Export(_saveFileDialog.FileName, _chart.Series[0].Points.ToArray());
    _logger.Log(LangResource.GraphExportMessageText, Color.LimeGreen);
}

private void LoggerClearContentButton_Click(object sender, EventArgs e) =>
    _logger.Clear();

private void LoggerSaveContentButton_Click(object sender, EventArgs e)
{
    _saveFileDialog.FileName = "Output";
```

```

if (_saveFileDialog.ShowDialog() != DialogResult.OK)
    return;
_logger.SaveContent(_saveFileDialog.FileName);
_logger.Log(LangResource.OutputSavedMessageText, Color.LimeGreen);}
private void LoggerCopyContentButtom_Click(object sender, EventArgs e) =>
    _logger.CopyContent();

```

Приклад вікна взаємодії показано на рисунку 3.8.

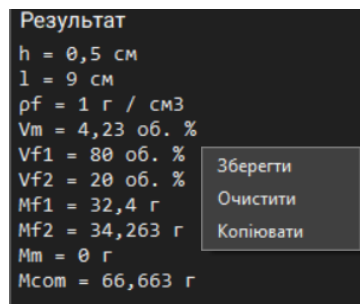


Рисунок 3.8– Вікно взаємодії

3.4 Розгортання

Програма упакована в інсталяційний пакет, який після скачуванні зразу дає змогу відкрити програму, без середи розробки. Приклад вигляду файлів програми при встановленні показаний на рис.3.9.

Имя	Размер	Сжат	Тип	Изменён	CRC32
..			Папка с файлами		
uk			Папка с файлами	07.01.2022 16:43	
ru			Папка с файлами	07.01.2022 16:43	
en			Папка с файлами	07.01.2022 16:43	
TcPC.url	252	177	Ярлык Интернета	29.12.2021 21:59	BC387672
TcPC.pdb	167 424	40 582	Файл "PDB"	07.01.2022 16:12	97431F5C
TcPC.exe.config	2 059	477	XML Configuration ...	07.01.2022 16:07	A669236E
TcPC.exe	570 880	350 922	Приложение	07.01.2022 16:12	1642B85A
MaterialSkin.dll	587 776	301 724	Расширение прил...	18.05.2015 16:45	D43FCBB3
desktop.ini	244	147	Параметры конфи...	07.01.2022 16:03	DAB41D62

Рисунок 3.9 – Вид скачаної програми

Для редагування та оновлення програми застосовується середа розробки Visual Studio.

3.5 Логування

Було добавлені засоби для відстеження помилок та подій у додатку.

Приклади таких засобів:

- підтвердження при виході з програми;
- повідомлення при невірному заповненні полів вводу даних;
- відстеження помилок при побудові графіків.

Приклад синтаксису такого засобу представлений в лістингу 3.11:

Лістинг 3.11 – Приклад синтаксису для відстеження помилок та подій.

```
if (dialogResult == DialogResult.Yes)
    Application.Exit();
```

Також був застосований оператор Try/Catch для відстеження помилок в програмі.

3.6 Розробка інструкції щодо застосування програм «Теплопровідність поліімідного композиту»

Була розроблена інструкція, яка детально описує процес застосування програми «Теплопровідність поліімідного композиту $TcPC$ » для розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композиційних теплопровідних плівок. Ця інструкція допоможе користувачу спрогнозувати ефективну теплопровідність поліімідних композиційних теплопровідних плівок за моделлю Бургера та перколяції.

3.6.1 Завантаження та запуск програми

Завантажити файл програми можна на сайті за посиланням <https://sites.google.com/view/tcpc2021/%D0%B3%D0%BB%D0%B0%D0%B2%D0%BD%D0%B0%D1%8F-%D1%81%D1%82%D1%80%D0%B0%D0%BD%D0%B8%D1%87%D0%BA%D0%B0?authuser=0>. Після завантаження файлу програми необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче.

Вилучаємо TcPC-master.zip файл.

Відкриємо вилучену папку *TcPC-master* і запусимо програму TcPC, процес показан на рис. 3.10.

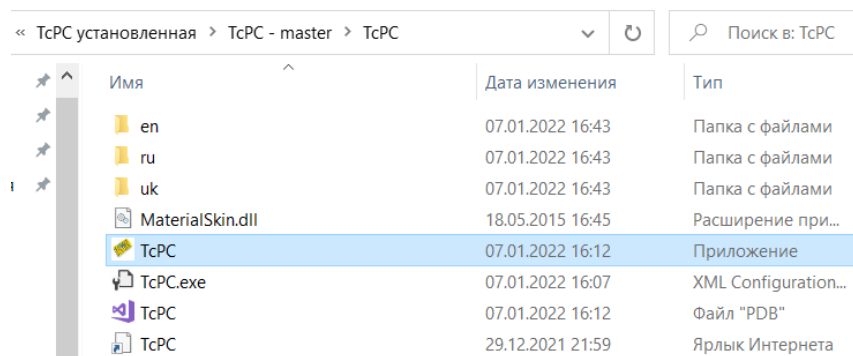


Рисунок 3.10 – Папка з основними файлами програми

Після запуску «TcPC» на екрані комп'ютера з'являється «Головне меню програми» (рис. 3.11).

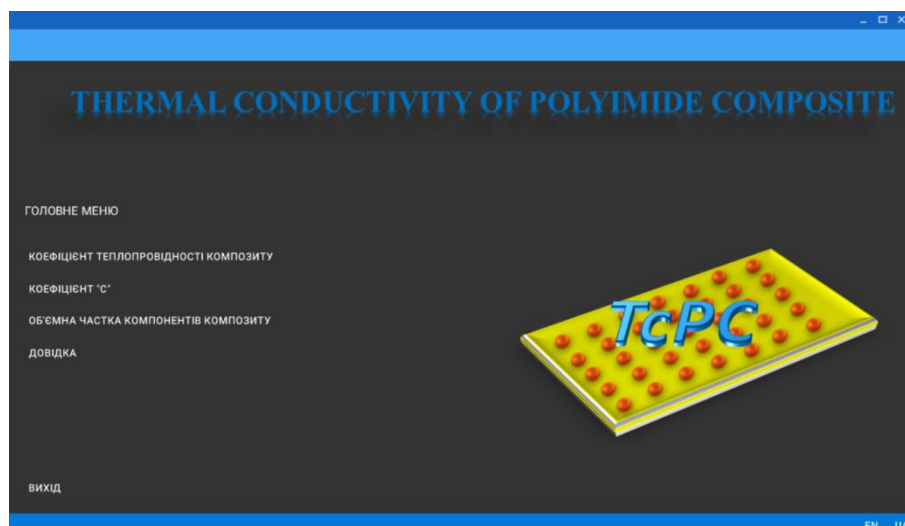


Рисунок 3.11 – Головне меню програми

3.6.2 Розрахунок коефіцієнта теплопровідності композиту за моделлю Бургера

Для розрахунку ефективної теплопровідності двокомпонентних сумішей з різним вмістом порошкових наповнювачів (згідно з моделлю Бургера) в програмі «ТсРС» необхідно виконати послідовність дій, наведених нижче (рис. 3.13):

- натиснути на розділ «Коефіцієнт теплопровідності композиту»;
- вибрати «Модель Бургера» та натиснути «Продовжити»;
- після вибору моделі відкривається вікно «Модель Бургера»;
- ввести дані:
 - 1) теплопровідність наповнювача і сполучного λ_m, λ_f ;
 - 2) об'єм наповнювача V_f ;
 - 3) коефіцієнт C .
- ввести крок та діапазон побудови графіка;
- натиснути кнопку «РОЗРАХУВАТИ»;
- у панелі Результати з'являються результати розрахунку ефективної теплопровідності;
- у панелі Графіка з'являються графік залежності ефективної теплопровідності від об'єму наповнювача.

Після цього ми отримаємо результат, показаний на рисунку 3.12

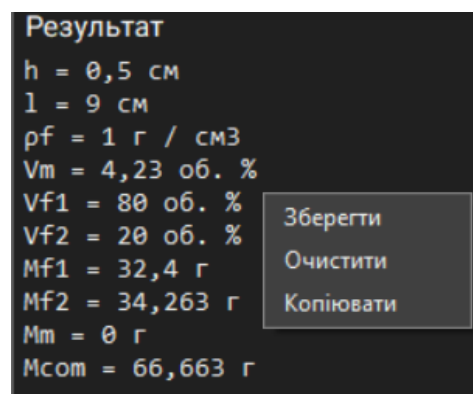


Рисунок 3.12 – Результат дії програми

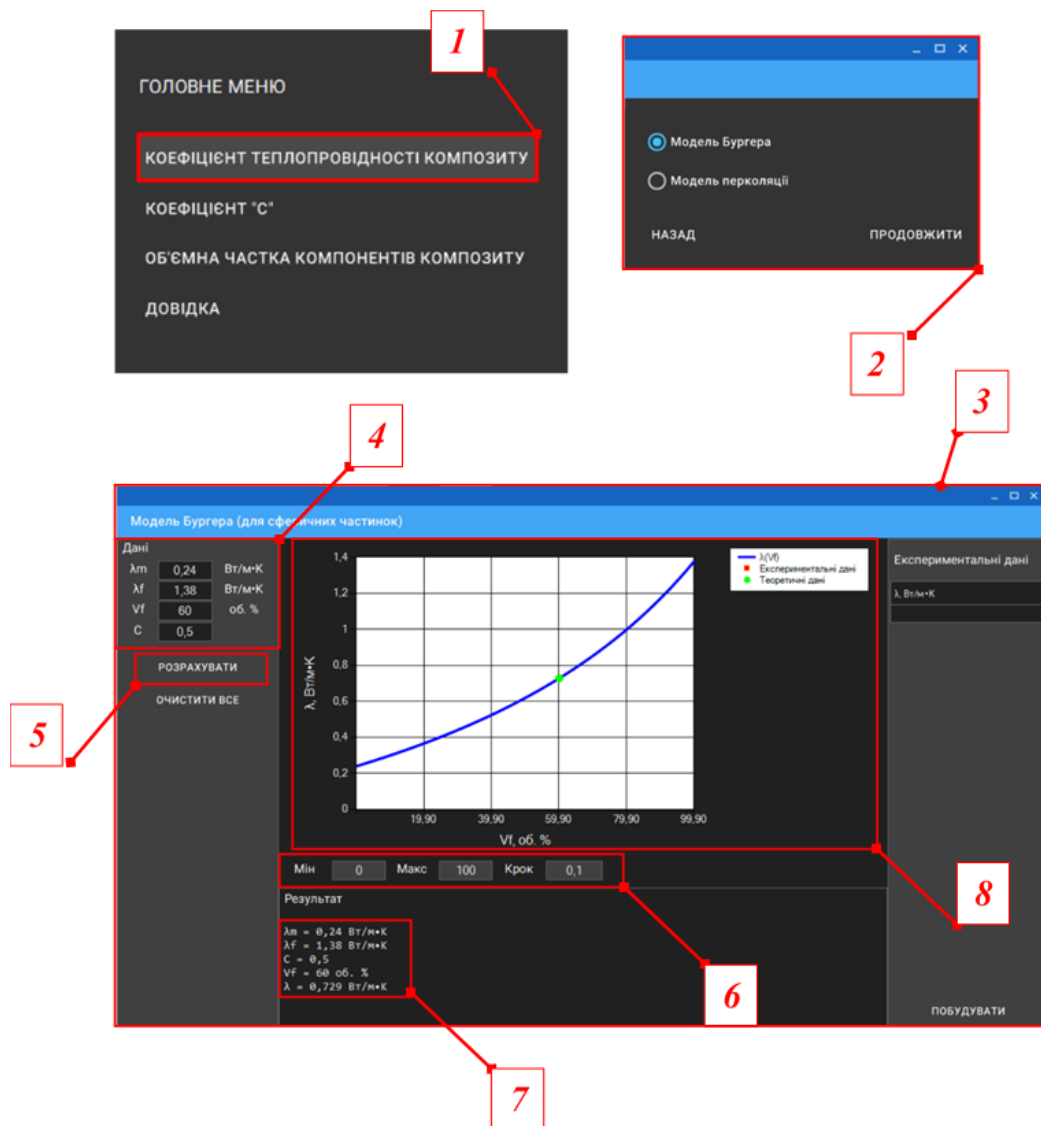


Рисунок 3.13 – Дії розрахунку ефективної теплопровідності з різним вмістом порошкових наповнювачів по моделі Бургера в програмі «TcPC»

Для того щоб обчислити значення відхилень експериментально отриманих значень коефіцієнта теплопровідності композиційного матеріалу від теоретично розрахованих за моделлю необхідно здійснити послідовність операцій, перерахованих нижче (рис. 3.14):

- ввести значення експериментальних даних в панель «Експериментальні дані»;
- натиснути «ПОБУДУВАТИ»;
- отримуємо результат значень відхилень та точки на графіку.

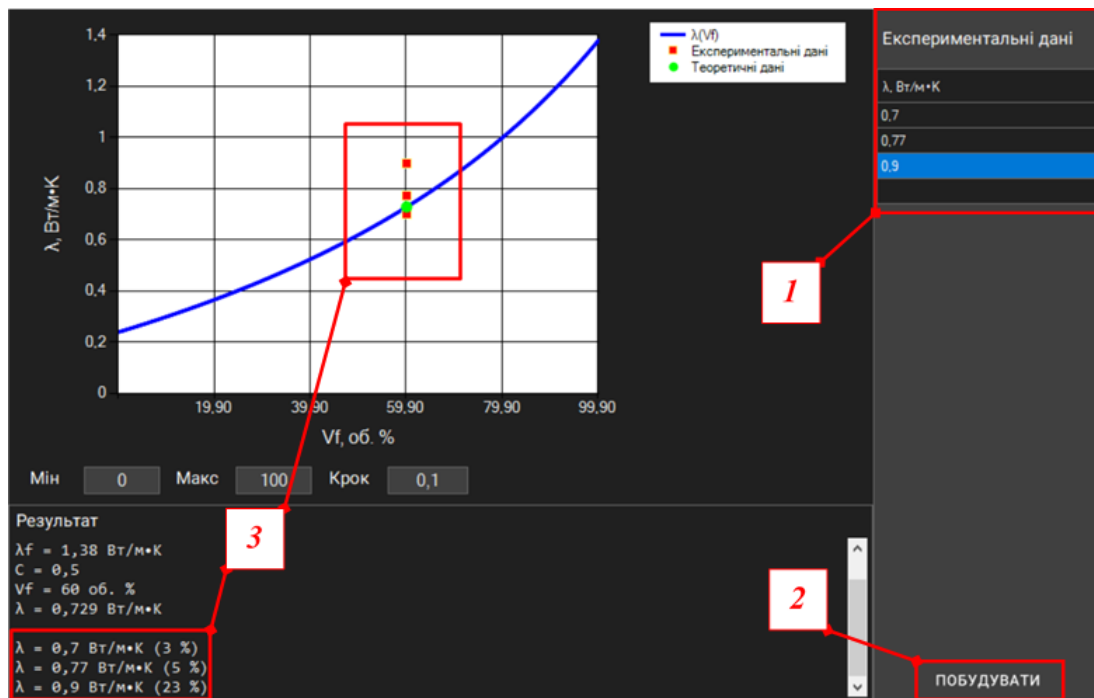


Рисунок 3.14 – Дії для обчислення значення відхилень експериментальних даних від теоретичних даних

3.6.3 Розрахунок коефіцієнта теплопровідності композиту за моделлю перколяції

Для розрахунку теплопровідності однокомпонентної високонаповненої композитної плівки, яка містить тільки один тип матеріалу наповнювача, використовують модель перколяції (порога протікання).

Для розрахунку теплопровідності високонаповненої композитної плівки та для побудови графіка залежності коефіцієнта теплопровідності від об'єму наповнювача за моделлю перколяції, необхідно виконати дії (рис. 3.15):

- у головному меню програми натиснути на розділ «Коефіцієнт теплопровідності композиту»;
- вибрати «Модель перколяції» та натиснути «ПРОДОВЖИТИ»;
- після цього відкривається основне вікно розділу "Поріг перколяції". Далі дії аналогічні з пункт 2.3.2.

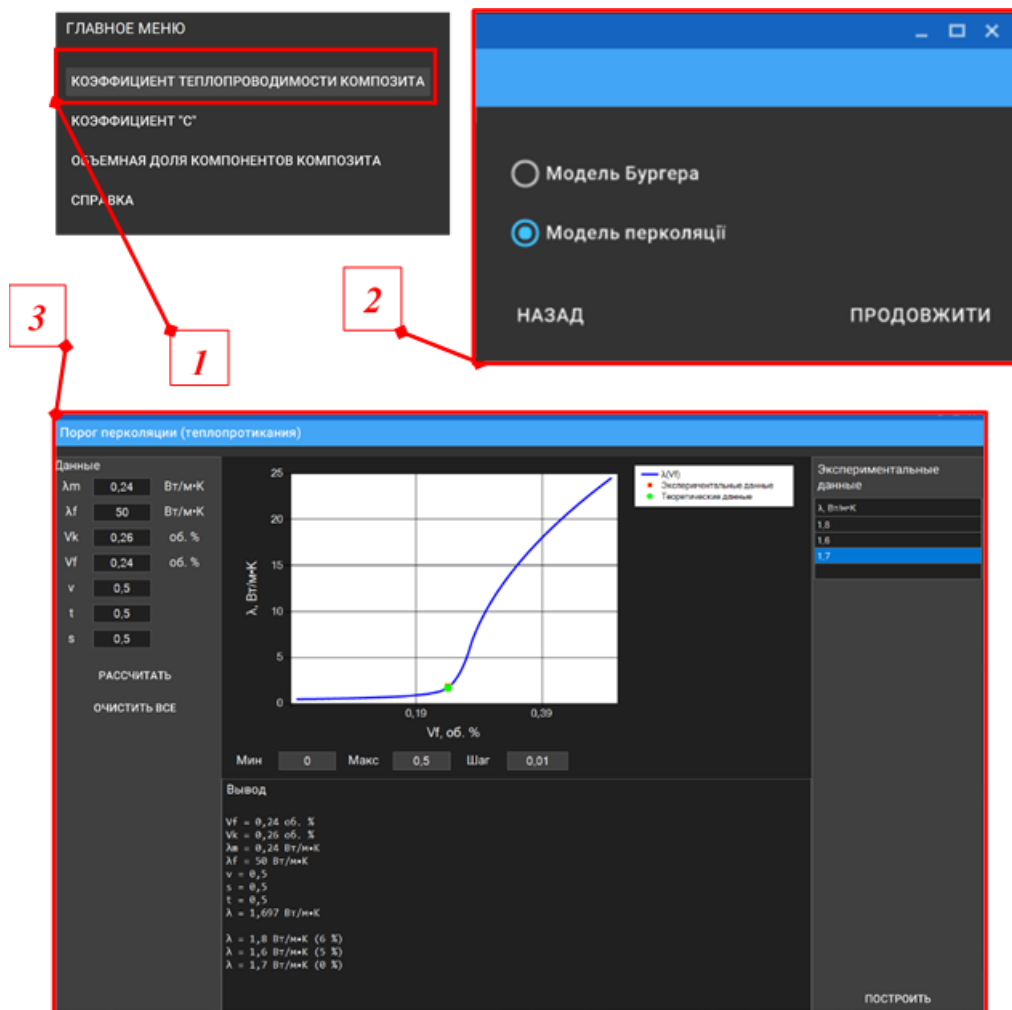


Рисунок 3.15 – Дії розрахунку ефективної теплопровідності з різним вмістом порошкових наповнювачів по моделі перколяції в програмі «TcPC»

Дані які потрібно ввести для розрахунку теплопровідності композитної плівки за моделлю перколяції:

- теплопровідність наповнювача і сполучного λ_m, λ_f ;
- об'єм наповнювача V_f ;
- критичний об'єм наповнювача V_k ;
- критичні індекси v, s, t .

Для того щоб обчислити значення відхилень експериментально отриманих значень коефіцієнта теплопровідності композиційного матеріалу від теоретично розрахованих за моделлю послідовність операцій аналогічні з пунктом 3.6.2.

3.6.4 Розрахунок та вибір коефіцієнта «С» за експериментальними даними для розрахунків теплопровідності за моделлю Бургера

Для прогнозування коефіцієнта «С» за експериментальними даними та побудування графіка залежності коефіцієнта «С» від λ_f/λ_m необхідно здійснити послідовність операцій, перерахованих нижче (рис. 3.16):

- в головному меню програми натиснути на розділ "Коефіцієнт С";

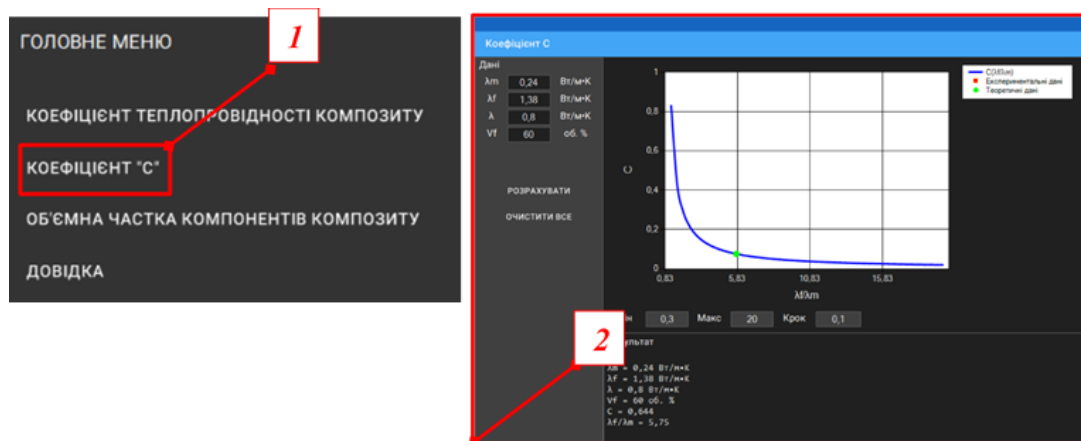


Рисунок 3.16 – Дії прогнозування коефіцієнта «С» за експериментальними даними в програмі «ТсРС»

– після цього відкривається основне вікно розділу "Коефіцієнт С". Далі дії аналогічні з пункт 3.6.2.

3.6.5 Розрахунок об'ємної та масової концентрації компонентів композиту

Для виготовлення експериментального зразка необхідно розрахувати об'ємну або масову концентрацію компонентів композиту. Для розрахунку об'ємної або масової концентрації компонентів композиту необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче (рис. 3.17):

- в головному меню програми натиснути на розділ "Об'ємна частка компонентів композиту";
- з'являється меню "Об'ємна частка компонентів композиту".

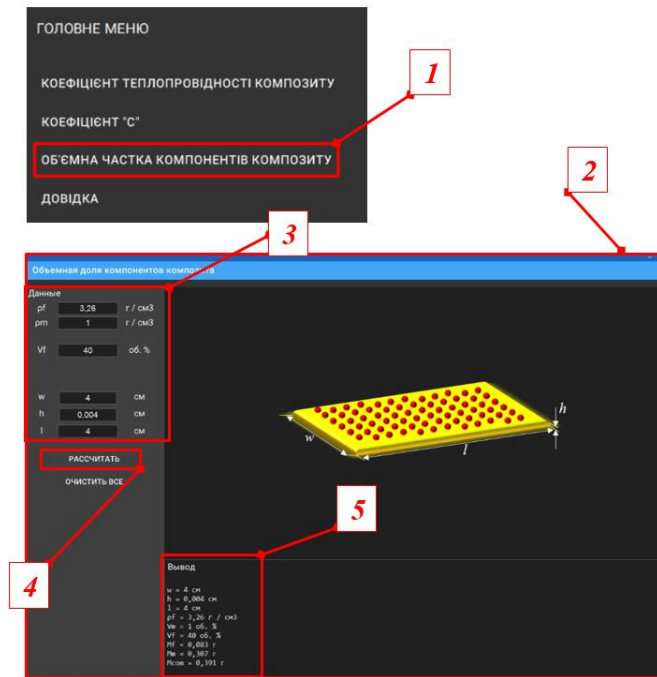


Рисунок 3.17 – Дії розрахунку об'ємну або масову концентрацію компонентів композиту в програмі «TcPC»

Ввести дані:

- густину наповнювача та сполучного ρ_f, ρ_m ;
- об'ємна доля наповнювача в композиті V_f ;
- параметри плівки w, t, l .

Натиснути кнопку «РОЗРАХУВАТИ».

Отримуємо результати.

3.6.6 Збереження даних розрахунку

Для збереження даних розрахунку можна скористатися двома способами, для першого необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче:

- натиснути праву кнопку миші та вибрати «Зберегти», як показано на рисунку 3.18.

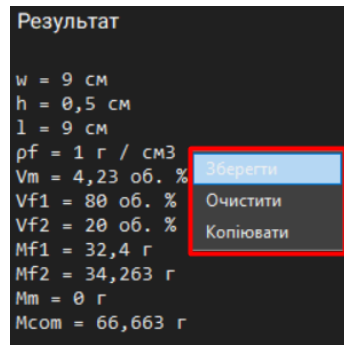


Рисунок 3.18 – Меню взаємодії з результатами

– вибрати шлях збереження, назву файлу та натиснути «Зберегти», як показано на рисунку 3.19.

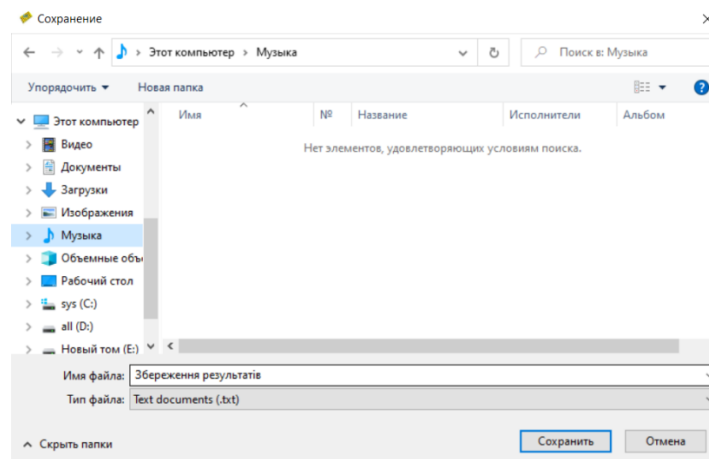


Рисунок 3.19 – Меню зберігання файлу з результатами

Відкрити файл (txt.), як показано на рисунку 3.20.

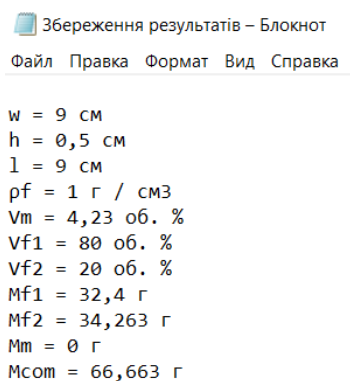


Рисунок 3.20 – Файл з результатами розрахунку

Для другого способу необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче:

– виділити результат, натиснути праву кнопку миші і вибрати "Копіювати", як показано на рисунку 3.21.

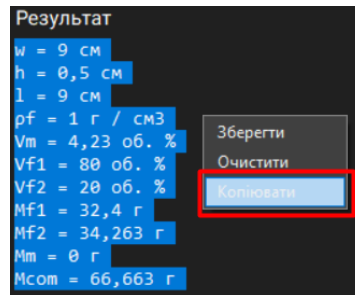


Рисунок 3.21 – Меню взаємодії з результатами

Вставимо результат у будь-який документ (наприклад, Word).

3.6.7 Експорт точок графіка залежності

Для експорту точок графіка необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче:

– натиснути праву кнопку миші на графіку та вибрати «Експорт», як показано на рисунку 3.22.

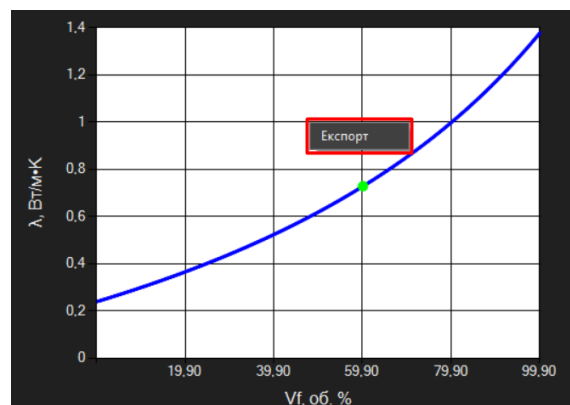


Рисунок 3.22 – Меню взаємодії з графіком

– вибрати шлях зберігання, назву файлу та натиснути «Експорт», як показано на рисунку 3.23.

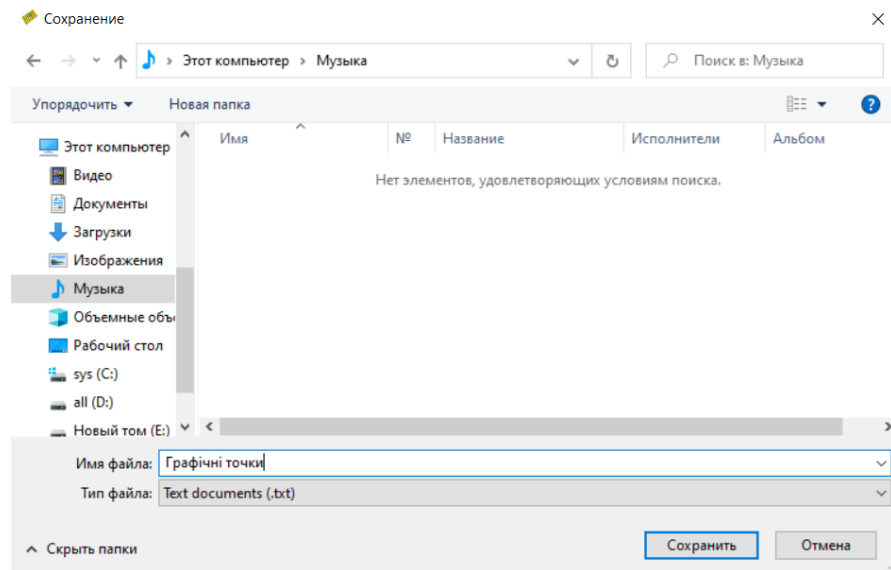


Рисунок 3.23 – Приклад зберігання графічних точок

– відкриваємо файл (txt.). За допомогою цього файлу можемо побудувати графіки, наприклад, в Excel, Origin Pro, як наведено на рисунку 3.24.

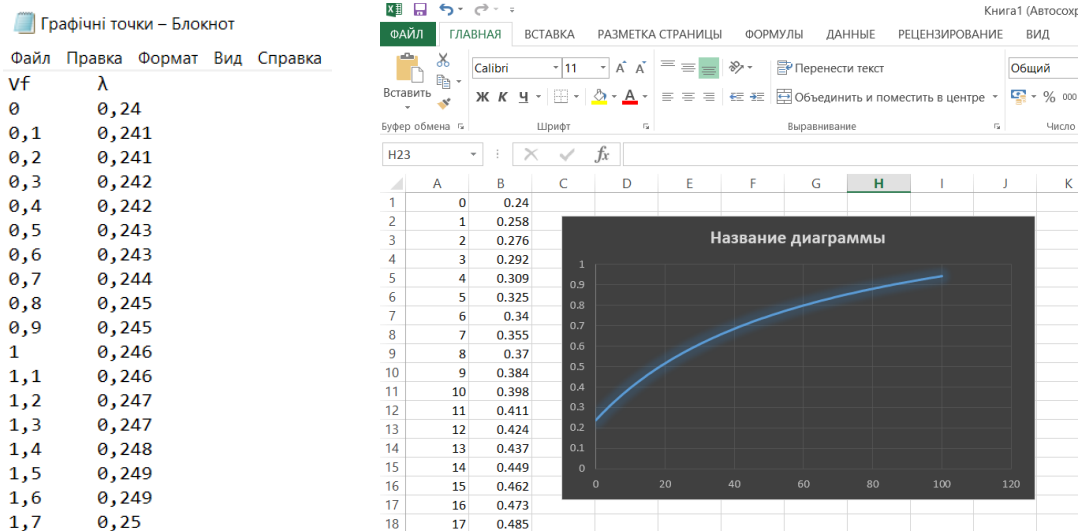


Рисунок 3.24 – Приклад розташування точок та побудови графіка в Excel

3.7 Висновки до розділу з розробки програми для автоматизації процесу розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитних плівок

В цьому розділі описані властивості та функції програми "Теплопровідність поліімідного композиту ТсРС", яка написана на базі .NET framework із використанням мови програмування С#. Основні можливості програми включають:

- розрахунок ефективного коефіцієнта теплопровідності;
- побудову графіків;
- розрахунок концентрацій компонентів;
- порівняння експериментальних та теоретичних даних.

Також у програмі реалізовано зручний користувачський інтерфейс і функції логування.

Кожна функція програми описана з демонстрацією роботи та додані лістинги функцій.

4 ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ

4.1 Дослідження методу прямого моделювання поліімідних композиційних структур з урахуванням граничних та початкових умов

Прогнозування ефективної теплопровідності наповнених полімерних систем вимагає знання не тільки теплових властивостей складових компонентів, але й ряд інших факторів. Дуже важливим з цієї точки зору є розробка моделі наповненого полімеру, а також моделювання граничних шарів, які дуже впливають на властивості наповненої полімерної композитної системи.

В процесі виконання експериментальної роботи було проведено розробка та написання програми «Теплопровідність поліімідного композиту» для автоматизації процесу розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитних плівок за аналітичною моделлю Бургера (1.3) та моделлю перколяції (1.8). Розрахунки виконані за формулою Бургера для різних наповнювачів і сполучного відповідають передбачуваній залежності коефіцієнта «С» від відношення λ_n / λ_{cv} в широкому діапазоні значень ефективної теплопровідності композитів λ_{ef} і об'ємного вмісту наповнювача V_n .

Однак на практиці теплопровідність композиту при одній і тій же концентрації наповнювача може змінюватись у великих межах. Це пов'язано з особливостями розподілу наповнювача у матриці. Особливо ця залежність проявляється при великій різниці коефіцієнтів теплопровідності матриці та наповнювача. Тому для підтвердження застосування розроблених структурних моделей та програм розрахунку теплопровідності за формулою Бургера необхідно виготовити та дослідити ефективну теплопровідність невиправдано великої кількості експериментальних зразків різних типів нових високонаповнених поліімідних композитних плівок. Необхідно визначити величину відхилень експериментально одержаних значень коефіцієнта теплопровідності композитного матеріалу від теоретично розрахованих за

моделлю. Здійснити розрахунок та провести корекцію значень коефіцієнтів «С» за експериментальними даними. Для проведення таких досліджень потрібні значні фінансові можливості, матеріальні та трудові витрати, оскільки серед полімерних композитних матеріалів поліімідні матеріали відрізняються відносно високою ціною. При цьому ціна високодисперсних порошків наповнювачів поліімідних композитних плівок може бути вищою, ніж у крупнодисперсних у кілька разів, а ціна нанопорошків вище ціни крупнодисперсних (десятки мкм) порошків майже на два порядки. Таким чином, якщо кількість наповнювача в композиті складатиме понад 50 мас. % то вартість нового композитного матеріалу, що розробляється, значною мірою визначатиметься вартістю наповнювачів. Загальна ж вартість матеріалу при цьому може різко зрости, тим самим зводячи нанівець одну з головних можливих переваг нових композитних матеріалів, що розробляються, перед їх аналогами – нижчу вартість. Крім того, в тих випадках, коли потрібно виконання розрахунку з можливістю зміни концентрацій частинок наповнювача в широкому діапазоні або варіювання форми та розміри частинок (одиниці мікрон, ультрамікронні або наночастинки), аналітичні моделі не можуть забезпечити достатню достовірність результатів.

У цій ситуації найбільш доцільним і надійним методом (крім експериментального) визначення ефективної теплопровідності нових поліімідних матеріалів є метод прямого моделювання, тобто чисельний метод розрахунку ефективного коефіцієнта теплопровідності поліімідного композитного матеріалу з урахуванням граничних і початкових умов [36]. Суть методу полягає у безпосередньому вирішенні рівняння теплопровідності з урахуванням граничних та початкових умов кінцево-різницевиими методами. Використання чисельних методів для знаходження ефективної теплопровідності композиційної системи дозволяє проводити більш точні розрахунки для різних розподілів наповнювача в матриці, що дозволяє врахувати вплив структури на теплові властивості композиту, а також наявність граничного шару.

Застосування методу прямого моделювання теплопровідності середовищ зі складною структурою дозволяє проводити розрахунки ефективної теплопровідності для різних розподілів частинок порошків наповнювачів у

поліімідних сполучних. При цьому є можливість зміни концентрації частинок наповнювачів у матриці у широкому діапазоні або варіювання розміру частинок, що дозволяє врахувати вплив структури та граничних шарів на теплові властивості композитів.

У цьому випадку композитна система (поліімідний композитний матеріал), теплопровідність якої необхідно розрахувати, моделюється у вигляді куба, розбитого на комірки [37-40].

На рис. 4.1 зображено модельне уявлення композитної системи у вигляді куба, розбитого на елементарні комірки.

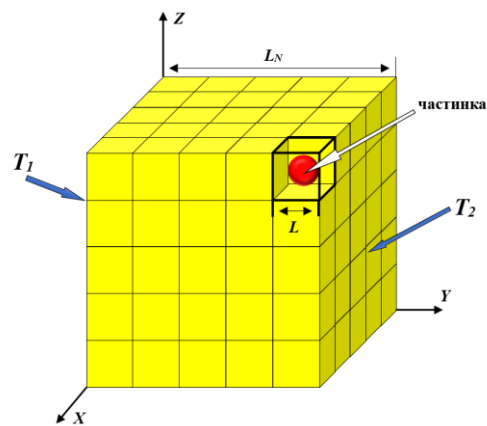


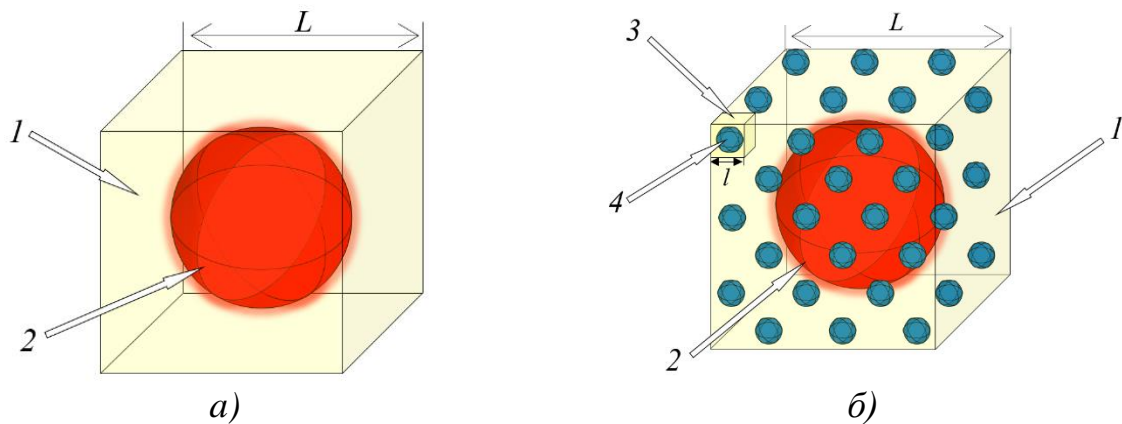
Рисунок 4.1 - Модель композитної системи у вигляді куба, розбитого на елементарні комірки

На протилежних бокових гранях куба композитної системи з довжиною ребра L_N задаються різні температури T_1 та T_2 . В результаті вздовж одного із напрямків створюється температурний градієнт. Тепловий потік через інші грані куба відсутній.

При моделюванні розглядався рівномірний розподіл частинок. Об'єм матриці композиту можна уявити у вигляді декількох елементарних комірок, у кожній з яких поміщена одна частинка або кілька частинок наповнювача необхідної форми (рис. 4.2). На рис. 4.2, а зображено елементарну кубічну комірку з довжиною ребра L заповнену однією сферичною частинкою мікронного розміру наповнювача з діаметром $\varnothing = L$. При цьому максимальна

об'ємна концентрація матеріалу в такій елементарній кубічній комірці композитної системи становить не більше 52,4 об. %.

На рис. 4.4, б зображена елементарна кубічна комірка з довжиною ребра L заповнена однією сферичною частинкою з діаметром $\varnothing = L$ і додатковими кількома елементарними кубічними комірками з довжиною ребра l , які заповнені однією сферичною часткою субмікронного розміру з діаметром $\varnothing = l$.



Комірка, яка заповнена однією сферичною частинкою мікронного розміру

Комірка, яка заповнена однією сферичною частинкою мікронного розміру та додатковими кількома частинками субмікронного розміру

1,3 - елементарні комірки матриці композитної поліімідної плівки; 2 - наповнювач у формі сферичної частинки мікронного розміру; 4 - наповнювач у формі сферичної частинки субмікронного розміру

Рисунок 4.2 - Модельне уявлення рівномірного розподілу частинок наповнювачів

Для спрощення розрахункової моделі було прийнято ряд основних допущень:

- задачі розглядаються як стаціонарні, оскільки вирівнювання температури в теплопровідному об'ємі відбувається значно швидше, ніж зміна зовнішніх умов;

– матеріали, складові композита, вважаються ізотропними. При цьому їх теплопровідність не залежить від температури;

– розміри частинок кожного типу наповнювача вважаються однаковими. Поодинокі елементарні кубічні комірки з довжиною ребра L і l заповнені однією частинкою наповнювача сферичної форми мікронного або субмікронного розміру відповідно. Елементарні кубічні комірки рівномірно розподілені у всьому об'ємі композитної системи. Фракційний склад частинок не враховується.

– тепловий контакт між частинками та полімером приймається ідеальним (дане припущення тягне за собою зростання теплопровідності композиту внаслідок нульового теплового опору на межі середовищ полімер – частинка);

– наявність мікроефектів не враховується.

Параметризація чисельної моделі дозволяє варіювати властивості композитної системи; в даному випадку це розміри частинок, властивості їх матеріалів та властивості поліімідної матриці. Відповідно до моделі, зв'язок між довжиною L ребра куба елементарної комірки (вона визначає розмір розрахункової області та розмір частинки) та об'єм частинки V_f задається формулою:

$$L = \left(\frac{V_f}{N_v} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (4.1)$$

де N_v – об'ємна концентрація частинок.

Ефективна теплопровідність λ_{eff} поліімідного композитного матеріалу розраховувалася за формулою:

$$\lambda_{eff} = q_m \frac{L}{|T_1 - T_2|} \quad (4.2)$$

де λ_{eff} – ефективна теплопровідність композитного матеріалу;

m – середній тепловий потік;

L – довжина ребра куба;

$T_1 - T_2$ – різниця температур протилежних граней.

З метою визначення величини q_m виконується чисельне рішення тривимірної стаціонарної задачі теплопровідності:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0 \quad (4.3)$$

Коефіцієнт теплопровідності у цьому рівнянні залежить від координат:

$$\lambda = \lambda(x, y, z).$$

На двох поверхнях куба задаються граничні умови першого роду, на інших чотирьох накладаються умови теплоізоляції [40].

Для автоматизації розрахунку середнього теплового потоку q_m та ефективної теплопровідності λ_{eff} тонких поліімідних композиційних теплопровідних плівок зі складною структурою в роботі використано програмний комплекс COMSOL MULTIPHYSICS.

4.2 Виконання 3D - структурного моделювання комірок дослідних поліімідних композитних плівок та розрахунків їх середніх теплових потоків та ефективних коефіцієнтів теплопровідності за допомогою застосування стандартного програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS

У розрахунках використовувалися наповнювачі, що належать до групи високодисперсних та ультрадисперсних порошків. Вибір таких розмірів частинок наповнювачів обумовлений прагненням отримати на практиці необхідні значення електрофізичних і механічних характеристик поліімідних композитів при мінімальній вартості матеріалів, оскільки вартість компонентів може істотно впливати на підсумкову вартість композитів.

При аналізі характеру теплоперенесення у дисперсно-наповнених композитах слід враховувати той факт, що теплоперенесення через великі

частинки мікронного розміру відбувається легше, ніж через дрібні частинки. Це пов'язано з меншою протяжністю меж між великими частинками.

З іншого боку, дрібні частинки при ідентичних ступенях наповнення розташовані ближче один до одного в композиті, що означає формування більш тонкого міжфазного полімерного шару. Це дозволяє зменшити граничний тепловий опір наповнювач-матриця і, як результат, теплопередача через сітку частинок наповнювача стає більш ефективною.

При високій концентрації теплопровідних частинок механічні властивості композиту різко погіршуються, і матеріал стає жорстким і крихким. Тому створення поліімідного композиту, що поєднує в собі хороші механічні та теплопровідні властивості, є досить непростю задачею. Основна ідея ефективного управління теплофізичними характеристиками композитного матеріалу при високих ступенях наповнення полягає у максимізації теплопровідних шляхів поряд з мінімізацією граничного теплового опору наповнювач-наповнювач і наповнювач-матриця.

Таким чином, для розробки структурних моделей варіантів високонаповнених теплопровідних електроізоляційних композитних поліімідних матеріалів були обрані порошки наповнювачів SiO_2 , SiC , Al_2O_3 і AlN з дрібнодисперсними і ультрадисперсними розмірами частинок. В якості поліімідного сполучного був обраний поліімідний терморективний лак типу Pyre ML RC 5069, який є базовим матеріалом для виготовлення поліімідних плівок типу DuPont™ Kapton® HN, що мають високу термічну стабільність але низьку теплопровідність (0,12 Вт/(м•К)).

Такий вибір обумовлений необхідністю підтримки допустимих електрофізичних і механічних властивостей при розробці нових теплопровідних поліімідних композитних матеріалів.

В даний час теплопровідні електроізолюючі поліімідні плівки, що промислово випускаються, мають типову теплопровідність від 0,36 до

0,8 Вт/(м•К) при товщинах від 25 мкм до 75 мкм (1-3 mil, 1 mil ~ 25 мкм) і при цьому вони зберігають високу напругу електричного пробую, механічну стійкість та гнучкість [40, 41].

Тому для побудови структурних моделей та оцінки теплопровідності нових типів поліімідних композитних матеріалів з очікуваною теплопровідністю до $1,0 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ і більше товщина поліімідної плівки вибиралася не менше

25 мкм. Частинки порошоків теплопровідних наповнювачів, що мають форму кулі, мали діаметри, які кратні товщині композиту та становлять для дрібнодисперсних порошоків 8 мкм, а для ультрадисперсних порошоків 0,8 мкм і 0,4 мкм.

Такий підхід дозволяє уявити модель ділянки композитної системи у вигляді куба з довжиною ребра $L_N = 40 \text{ мкм}$, що має структуру кубічних ґрат $5 \times 5 \times 5$ з елементарними кубічними комітками з довжиною ребра $L = 8 \text{ мкм}$, рівномірно заповнених частинками. При цьому загальна кількість елементарних комірок у кубічних ґратах такої ділянки композиту становить 125 комірок (рис. 4.3).

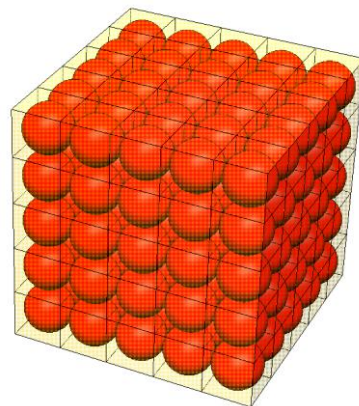


Рисунок 4.3 – Модель кубічних ґрат ділянки композитної системи

У табл. 4.1 представлені вихідні дані для розгляду різних варіантів структурних моделей поліімідних теплопровідних композитних плівок.

Температурний градієнт $(T_1 - T_2)$ протилежних граней кубічних ґрат композитів задавався при припущенні, що температура T_2 відповідає температурі навколишнього середовища $T_a = 25 \text{ }^\circ\text{C}$. Температура T_1 відповідає рекомендованій максимальній робочій температурі області $p-n$ переходу напівпровідникових джерел тепла і становить $T_j = 80 \text{ }^\circ\text{C}$ при стабільному стані теплового розподілу на кожній досліджуваній ділянці композитної системи.

Таблиця 4.1 – Структурні моделі поліімідних теплопровідних композитних плівок з різною об'ємною концентрацією наповнювачів у композитній системі

№	Типи порошоків наповнювачів	λ_n , Вт/(м•К)	$\lambda_{св}$, Вт/(м•К)	T_1 , °С	T_2 , °С	Об'ємна концентрація частинок N_v , об. %		
						Варіант 1	Варіант 2	Варіант 3
						8 мкм	8 мкм + 0,8 мкм	8 мкм + 0,4 мкм
1	SiO_2	7	0,12	80	25	0 – 52,4	0 – 69,5	0 – 73,5
2	Al_2O_3	11	0,12					
3	SiC	25	0,12					
4	AlN	55	0,12					

На рис. 4.4 представлені варіанти досліджуваної структурної 3D моделі елементарних комірок поліімідних композитних плівок.

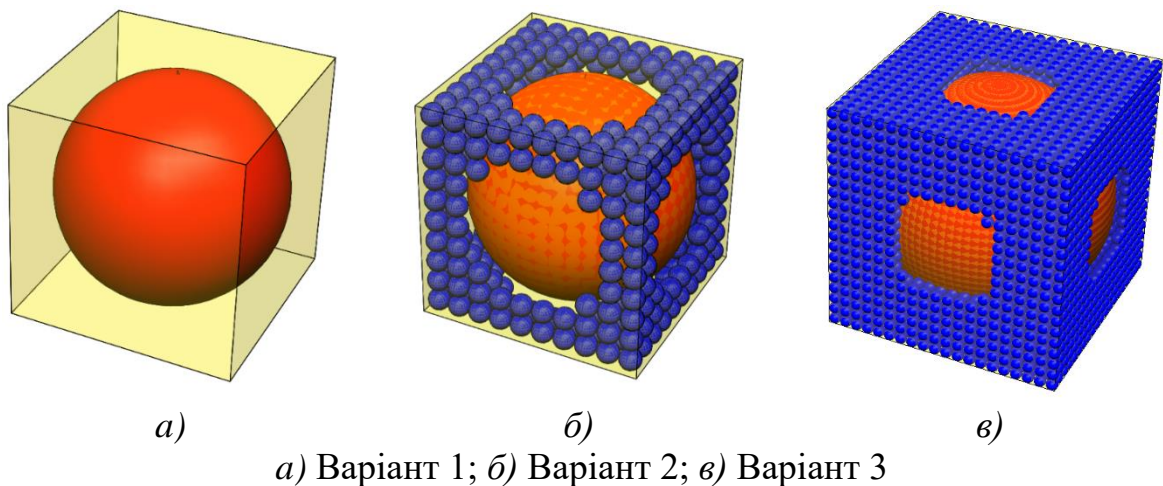


Рисунок 4.4 - Досліджувана структурна 3D модель комірок поліімідних композитних плівок

Для варіанта 1 одна елементарна комірка кубічної ґратки з довжиною ребра 8 мкм має об'єм рівний 512 мкм^3 , а одна сферична частка діаметром 8 мкм в комірці має об'єм рівний 268 мкм^3 (рис. 4.4,а). При цьому максимальна об'ємна

концентрація матеріалу частинки наповнювача у такій елементарній комірці композитної системи складе не більше 52,4 об. %.

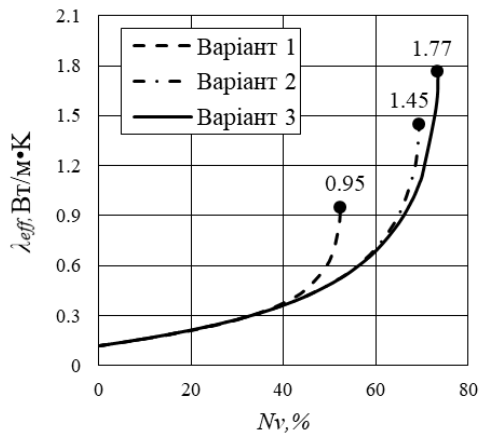
Для досягнення об'ємної концентрації частинок наповнювача більш ніж 52,4 об. % у структурну 3D модель елементарної комірки були додані додаткові ультрадисперсні частинки. Таким чином, для варіанта 2 одна елементарна комірка кубічної ґратки з довжиною ребра 8 мкм має об'єм рівний 512 мкм^3 , одна сферична частка діаметром 8 мкм в комірці має об'єм рівний 268 мкм^3 . Додані сферичні частинки діаметром 0.8 мкм (328 шт.) у комірці мають об'єм рівний 88 мкм^3 (рис. 4.4,б). При цьому максимальна об'ємна концентрація матеріалу частинок наповнювача в такому комбінованому варіанті елементарної комірки композитної системи становитиме 69,5 об. %.

Для варіанта 3 одна елементарна комірка кубічної ґратки з довжиною ребра 8 мкм має об'єм рівний 512 мкм^3 , одна сферична частка діаметром 8 мкм в комірці має об'єм рівний 268 мкм^3 .

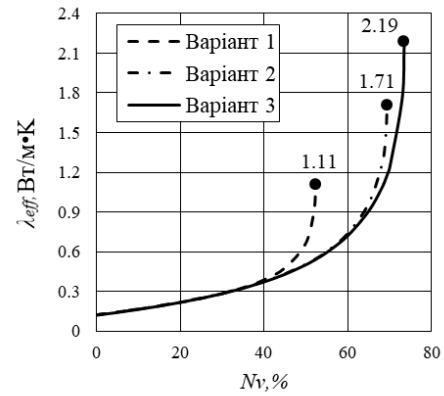
Додані сферичні частинки діаметром 0,4 мкм (3224 шт.) у комірці мають об'єм рівний 108 мкм^3 (рис. 4.4,в). При цьому максимальна об'ємна концентрація матеріалу частинок наповнювача в такому комбінованому варіанті елементарної комірки композитної системи становитиме 73,5 об. %.

За допомогою програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS® та формули (1.5) були виконані 3D - структурне моделювання комірок поліімідних композитних плівок і розрахунки середніх теплових потоків та ефективних коефіцієнтів теплопровідності поліімідних композитних плівок для варіанта 1, варіанта 2 та варіанта 3.

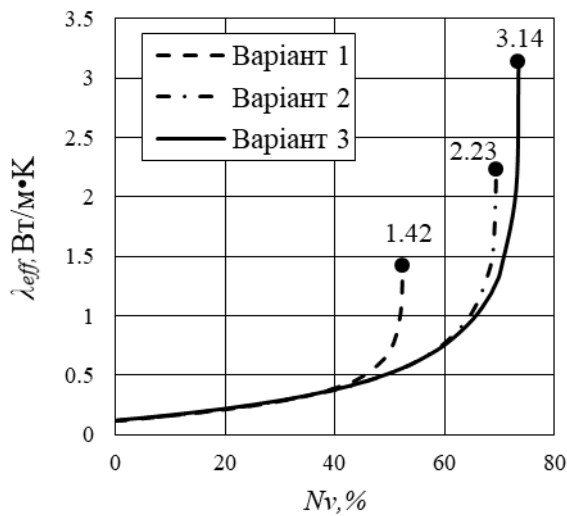
На рис. 4.5 показано результати розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитних плівок для різних наповнювачів та об'ємної концентрації частинок наповнювачів.



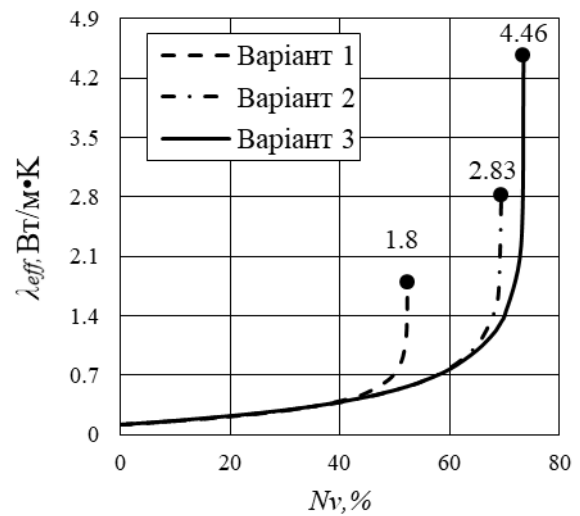
а)



б)



в)



г)

Рисунок 4.5 – Розрахункові значення ефективної теплопровідності поліімідних композитних систем для різних порошкових наповнювачів залежно від об'ємної концентрації частинок наповнювачів: а) SiO₂; б) Al₂O₃; в) SiC; г) AlN

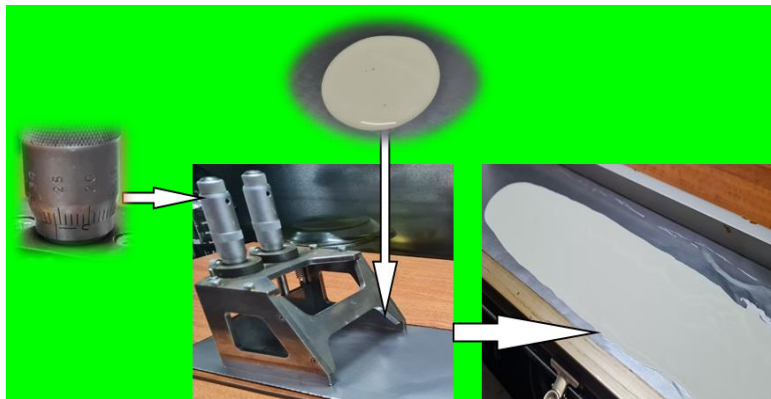
Варіювання кількістю наповнювача у поліімідній матриці дозволило встановити, що більш високі теплопровідні властивості досягаються при вмісті частинок наповнювача в поліімідному композиті не менше 52,4 об. % та зростають при подальшому збільшенні вмісту наповнювача.

Максимальна ефективна теплопровідність спостерігалася для варіантів композитних матеріалів, в яких у якості наповнювача використовується суміш мікронних і ультрамікронних частинок порошків наповнювачів з переважним вмістом мікрочастинок.

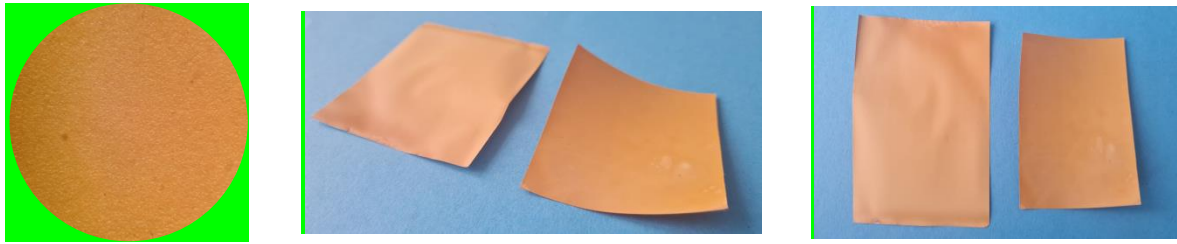
При загальному об'ємі концентрації наповнювачів від 52,4 об. % до майже 69,5 об. % у композитах при складі сумішей порошків близько 75 % із середніми розмірами частинок до 8 мкм та 25 % із середніми розмірами частинок до 0,8 мкм підтверджена чисельними розрахунками очікувана максимальна ефективна теплопровідність ПКП в діапазоні значень від 0,95 Вт/(м•К) до 2,83 Вт/(м•К) для досліджених порошків наповнювачів із SiO_2 , SiC , Al_2O_3 та AlN .

При загальному об'ємі концентрації наповнювачів від 52,4 об. % до майже 73,5 об. % у композитах при складі сумішей порошків близько 71 % із середніми розмірами частинок до 8 мкм та 29 % із середніми розмірами частинок до 0,4 мкм підтверджена чисельними розрахунками очікувана максимальна ефективна теплопровідність ПКП в діапазоні значень від 0,95 Вт/(м•К) до 4,46 Вт/(м•К) для досліджених порошків наповнювачів із SiO_2 , SiC , Al_2O_3 та AlN .

На рис. 4.6 представлені результати виготовлення експериментальних композитних поліімідних плівок товщиною 30 мкм з порошковим наповнювачем AlN (об'єм наповнювача $V_n = 40$ об. %, $\lambda_{eff} =$ більш ніж 0,5 Вт/(м•К)) на алюмінієвій фользі товщиною 15 мкм.



а) нанесення суміші ПІ лаку з порошковим наповнювачем з AlN на алюмінієву фольгу товщиною 15 мкм



б) композитні поліімідні плівки товщиною 30 мкм з порошковим наповнювачем з AlN (об'єм наповнювача $V_n = 40$ об. %)

Рисунок 4.6 – Експериментальні композитні поліімідні плівки товщиною 30 мкм з порошковим наповнювачем з AlN (об'єм наповнювача $V_n = 40$ об. %) на алюмінієвій фользі товщиною 15 мкм

4.3 Розробка інструкції щодо застосування програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS

Була розроблена інструкція, яка детально описує процес застосування програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS для розрахунку середнього теплового потоку та ефективної теплопровідності тонких поліімідних композиційних теплопровідних плівок зі складною структурою. Ця інструкція допоможе користувачу з моделюванням комірок поліімідної композиційної теплопровідної плівки з рівномірним розташуванням частинок та автоматизувати розрахунки ефективної теплопровідності композиту за допомогою програмної середовища.

4.3.1 Створення середовища моделювання стаціонарної теплової задачі в програмі COMSOL MULTIPHYSICS

Для того щоб створити середовище моделювання теплової задачі в програмі COMSOL MULTIPHYSICS необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче (рис.4.7):

- запустити програму COMSOL Multiphysics (двічі натискаємо на ярлик на робочому столі);
- у вікні New натискаємо кнопку Model Wizard;
- у вікні Select Space Dimension вибираємо 3D (Тримірний).

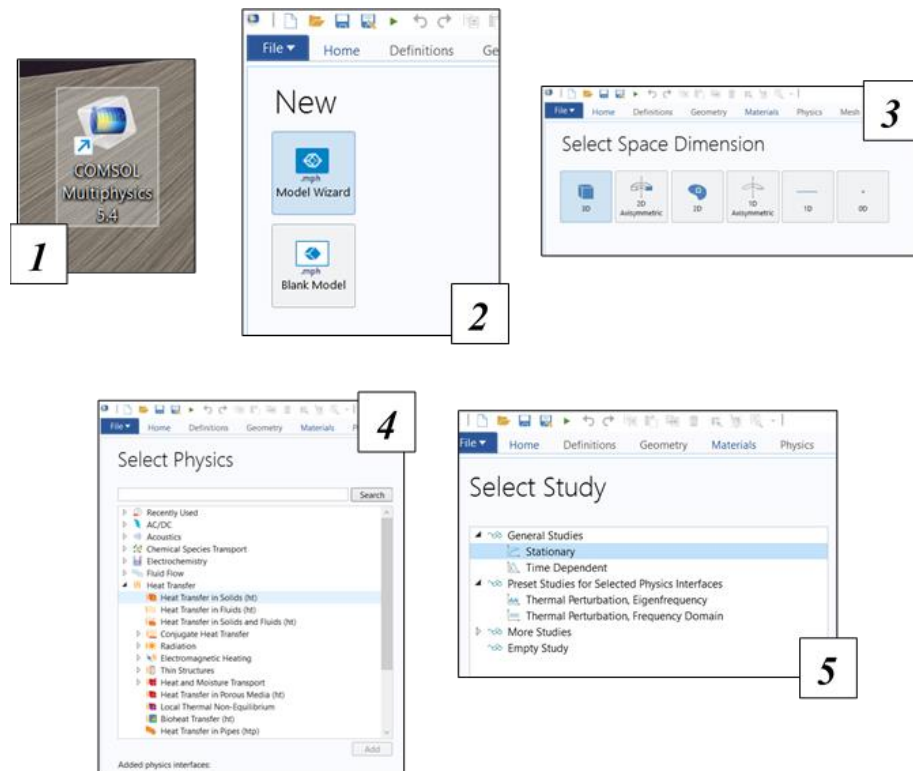


Рисунок 4.7 – Створення середовища моделювання теплової задачі в програмі COMSOL MULTIPHYSICS

У розділі Select Physics вибираємо Heat Transfer > Heat Transfer in Solids (ht) і натискаємо Add.

У розділі General Studies вибираємо Stationary і натискаємо Done. Вирішувач та налаштування рівнянь для встановлених досліджень адаптуються

до обраної фізики. Так як у нас не буде залежності температури від часу, то використовуємо стаціонарне дослідження - Stationary.

4.3.2 Глобальні визначення (Global Definitions)

Розділ "Global Definitions"(рис. 4.8) у програмі COMSOL Multiphysics дає можливість визначати глобальні параметри та функції, які можна використовувати в усьому моделюванні. Це включає константи, такі як фізичні величини, і змінні, які можуть бути використані для контролю різних аспектів моделі. Також можна створювати власні функції для специфічних розрахунків. Цей розділ є важливим для створення гнучких і ефективних моделей, оскільки дозволяє легко міняти значення, що впливають на всю модель, не змінюючи кожен розділ окремо. (рис. 4.9):

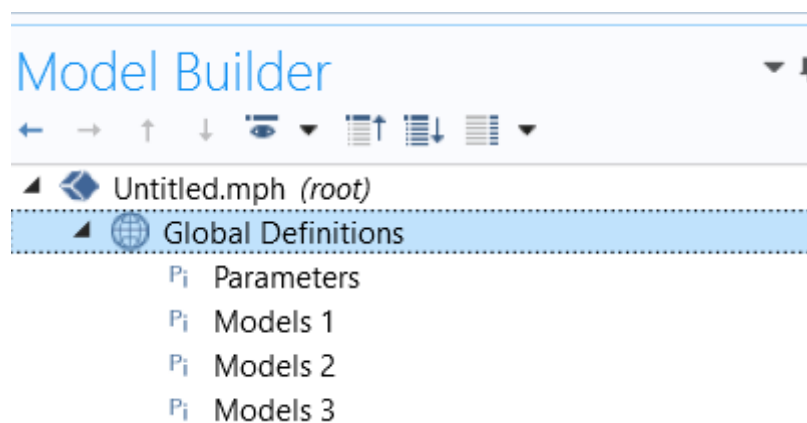


Рисунок 4.8 – Глобальні визначення

Parameters 1 (перейменований на Parameters) де задаємо розмір частинки (d_1 , d_2 , d_3), температуру T_1 та T_2 , об'ємну концентрацію частинок (N_v), параметри матеріалу (густина сполучного і наповнювача; теплопровідність сполучного і наповнювача; теплоємність сполучного і наповнювача) (рис. 4.9a).

Parameters 2 (перейменований на Models 1) де задаємо розрахунок параметра довжини ребра куба/комірки L_1 для Моделі 1(рис. 4.9б).

Parameters 3 (перейменований на Models 2) де задаємо розрахунок параметра довжини ребра куба/комірки L_2 для Моделі 2 (рис. 4.9в).

Parameters 4 (перейменований на Models 3) де задаємо розрахунок параметра довжини ребра куба/комірки L_3 для Моделі 3(рис. 4.9г).

Parameters

Label: Parameters

Name	Expression	Value	Description
d1	8 [µm]	8E-6 m	Розмір частинки d1
d2	800 [nm]	8E-7 m	Розмір частинки d2
d3	400 [nm]	4E-7 m	Розмір частинки d3
Nv	20	20	Обємна концентрація ч...
T1	80[degC]	353.15 K	
T2	20[degC]	293.15 K	
Pm	1420	1420	Густина сполучного, кг/...
Tm	0.12	0.12	Теплопровідність сполу...
Cpm	1090	1090	Теплоємність сполучно...
Pf	3260	3260	Густина наповнювача,...
Tf	55	55	Теплопровідність напо...
Cpf	740	740	Теплоємність наповню...

а)

Parameters

Label: Models 1

Name	Expression	Value	Description
p	3.1415926...	3.1416	
Vf1	(4/3)*p*(...	2.6808E-16 m³	
L1	(Vf1/(Nv/1...	1.1026E-5 m	

б)

Parameters

Label: Models 2

Name	Expression	Value	Description
Nn1	Nv*a2.1	15.06	Nv2 (g1), %
Nn2	Nv*a2.2	4.9398	Nv2 (g2), %
Vf2	(4/3)*p*(...	2.6808E-16 m³	
L2	(Vf2/(Nn1...	1.2119E-5 m	
vf2	((4/3)*p*(...	8.7931E-17 m³	
Vcom2	d1^3	5.12E-16 m³	
Vm2.2	(Vcom2*v...	82.826	
n2.2	100-Vm2.2	17.174	
Vm2.1	(Vcom2-V...	47.64	
n2.1	100-Vm2.1	52.36	
Nnn2	n2.1+n2.2	69.534	
a2.1	n2.1/Nnn2	0.75301	
a2.2	n2.2/Nnn2	0.24699	
d21	d1/10	8E-7 m	d2(max)

в)

Parameters

Label: Models 3

Name	Expression	Value	Description
Nn3.1	Nv*a3.1	14.255	Nv3 (d1), %
Nn3.2	Nv*a3.2	5.7448	Nv3 (d2), %
d31	d1/20	4E-7 m	d3(max)
Vf3	(4/3)*p*(...	2.6808E-16 m³	
L3	(Vf3/(Nn3...	1.2343E-5 m	
vf3	((4/3)*p*(...	1.0804E-16 m³	
Vcom3	d1^3	5.12E-16 m³	
Vm3.2	(Vcom3-v...	78.899	
n3.2	100-Vm3.2	21.101	
Vm3.1	(Vcom3-V...	47.64	
n3.1	100-Vm3.1	52.36	
Nnn3	n3.1+n3.2	73.461	
a3.1	n3.1/Nnn3	0.71276	
a3.2	n3.2/Nnn3	0.28724	

г)

а) Parameters 1 (Parameters); б) Parameters 2 (Models 1);

в) Parameters 3 (Models 2); г) Parameters 4 (Models 3);

Рисунок 4.9 – Вікно вузла Parameters

4.3.3 Побудова геометрії комірки поліміідної композиційної теплопровідної плівки з рівномірним розташуванням частинок

4.3.3.1 Побудова геометрії комірки з однією сферичною частинкою (Модель 1)

Для побудови геометрії Моделі 1 яка має вигляд елементарної кубічної комірки с довжиною ребра L_1 заповнена однією сферичною частинкою

наповнювача з розміром d_1 необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче (рис. 4.10):

– у розділі Component 1 (перейменований на Models 1) натискаємо правою кнопкою миші на Geometry 1 і вибираємо Block. У вікні Settings розділу Block задаємо параметри Width, Depth, Height (розмір комірки $L_1 \times L_1 \times L_1$);

– натискаємо правою кнопкою миші на Geometry 1 і вибираємо Sphere. У вікні Settings розділу Sphere задаємо параметри Radius (радіус частинки $d_1/2$), x , y , z (координати розташування частинки у комірці $x, y, z = L_1/2$);

– натискаємо лівою кнопкою миші на Geometry 1 і натиснути на Build All і у вікні Graphics побудується 3D модель комірки.

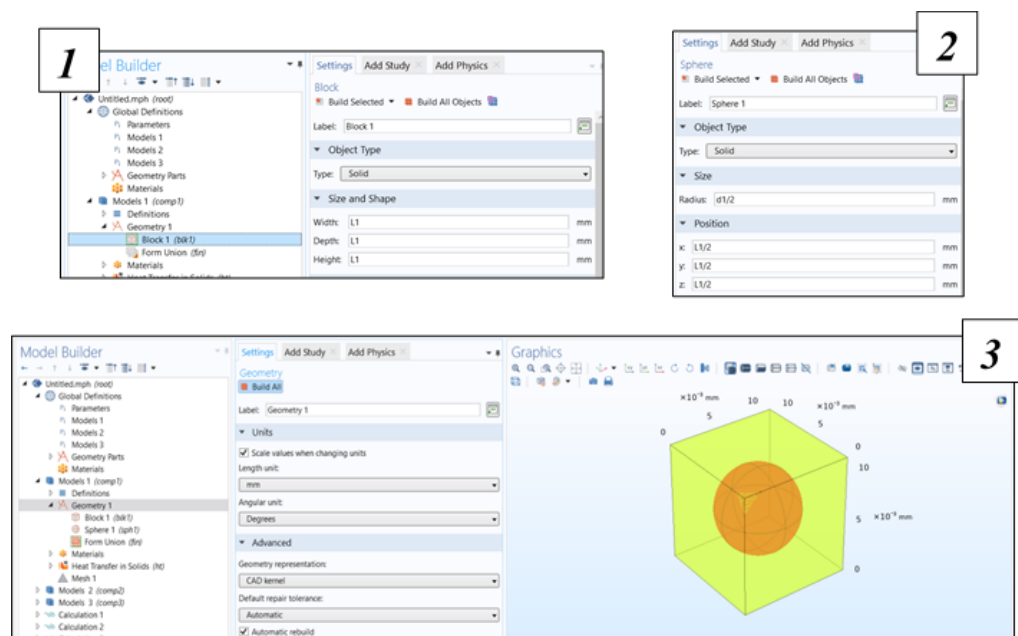


Рисунок 4.10 – Побудова 3D моделі комірки Моделі 1

4.3.3.2 Побудова геометрії комірки з однією сферичною частинкою яка доповнюється 328 елементарними кубічними комірками з однією сферичною частинкою (Модель 2)

Для побудови геометрії Моделі 2 яка має вигляд елементарної кубічної комірки з довжиною ребра L_2 заповнена однією сферичною частинкою наповнювача з розміром d_1 і доповнюється кількома елементарними кубічними комірками с довжиною ребра $l_2 = L_2/10$ які заповнені однією сферичною

частинкою з розміром d_2 ($d_2 \leq d_1/10$) необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче (рис. 4.11):

- перша і друга дія аналогічна побудові геометрії Моделі 1 (пункт 2.6.3.1) тільки замість L_1 вводимо L_2 ;
- натискаємо правою кнопкою миші на Geometry 1 і вибираємо Sphere. У вікні Settings розділу Sphere задаємо параметри Radius (радіус частинки $d_2/2$), x , y , z (координати розташування частинки у комірці x , y , $z = l_2/2$).

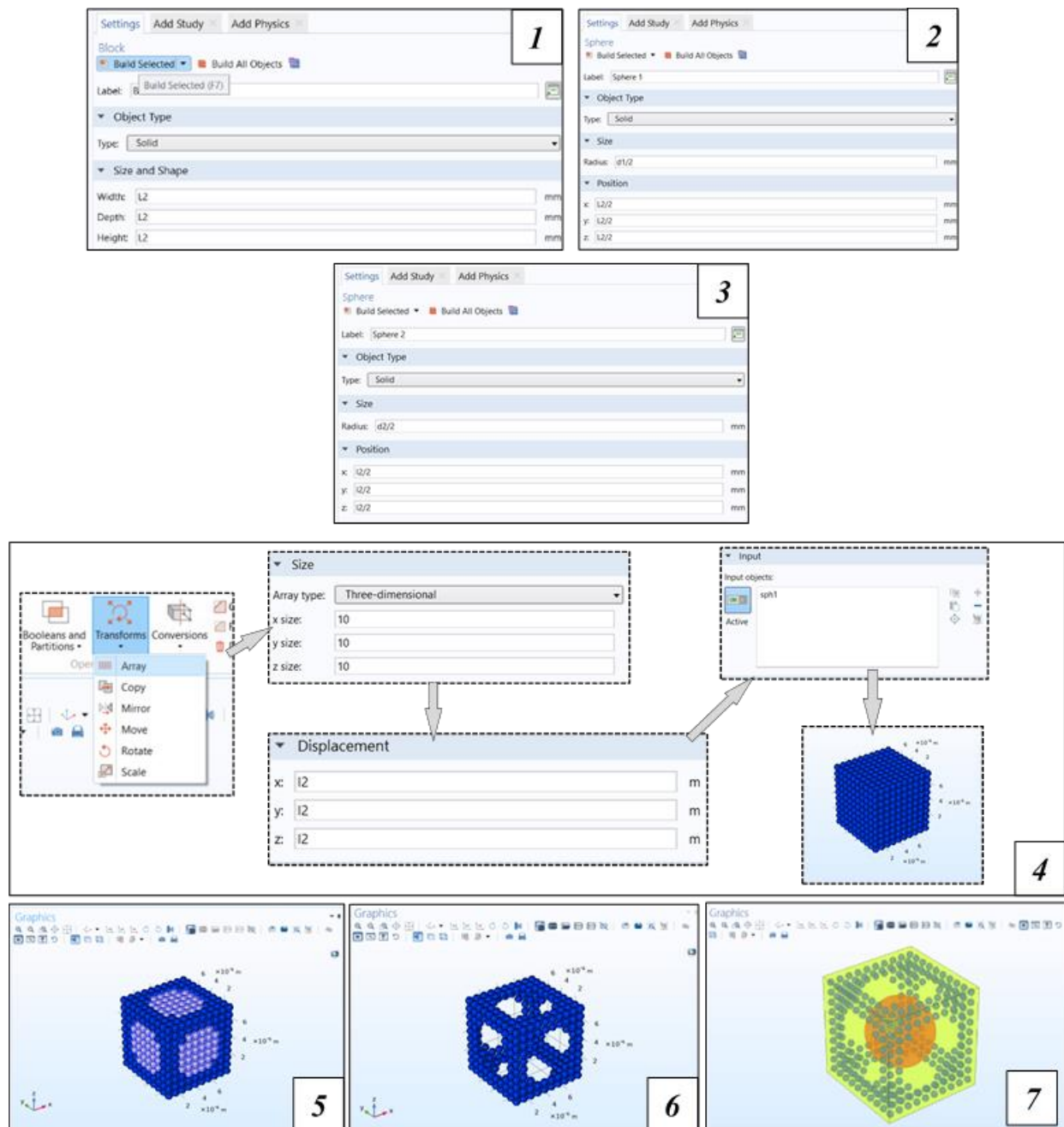


Рисунок 4.11 – Побудова 3D моделі комірки Моделі 2

Входимо в стандартну вкладку Geometry натискаємо лівою кнопкою миші на Transforms і вибираємо Array (створюємо 3D матрицю сфер/частинок).

У вікні Settings розділу Array задаємо:

- вибираєм Size> Array type> Three-dimensional і задаємо розмірність матриці x size, y size, z size (x, y, z size = 10);
- у Displacement задаємо x, y, z ($x, y, z = l_2$);
- у Input вибираємо Sphere (частинка с розміром d_2);
- натискаємо Build Selected та отримуємо результат;
- затискаємо кнопку Ctrl та вибираємо сфери які потрібно видалити;
- натискаємо кнопку Delete;
- натискаємо лівою кнопкою миші на Geometry 1 і натиснути на Build All і у вікні Graphics побудується 3D модель комірки.

4.3.3.3 Побудова геометрії комірки з однією сферичною частинкою яка доповнюється 3224 елементарними кубічними комірками з однією сферичною частинкою (Модель 3)

Для побудови геометрії Моделі 3 яка має вигляд елементарної кубічної комірки с довжиною ребра L_3 заповнена однією сферичною частинкою наповнювача з розміром d_1 і доповнюється кількома елементарними кубічними комірками с довжиною ребра $l_3 = L_3/20$ які заповнені однією сферичною частинкою з розміром d_3 ($d_3 \leq d_1 / 20$) необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче:

- перша і друга дія аналогічна побудові геометрії Моделі 1 (пункт 2.6.3.1) тільки замість L_1 вводимо L_3 ;
- третя, четверта і п'ята дія аналогічна побудові геометрії Моделі 2 (пункт 2.6.3.2) тільки замість l_2, d_2 вводимо l_3, d_3 і x, y, z size дорівнює не 10, а 20;
- натиснути лівою кнопкою миші на Geometry 1 і натиснути на Build All і у вікні Graphics побудується 3D модель комірки (рис. 4.12).

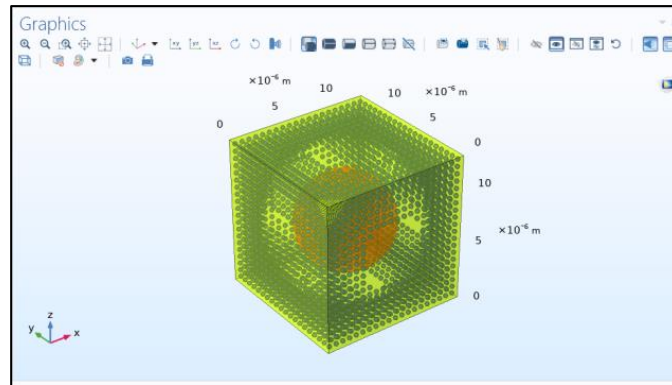


Рисунок 4.12 – Побудова 3D моделі комірки Моделі 3

4.3.4 Матеріали (Materials)

У вузлі Materials зберігаються фізичні властивості всіх компонентів поліімідної композитної системи (елементарної комірки). Для поліімідної композитної системи використовуються два матеріали для сполучного та наповнювача. Для створення матеріалу необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче (рис. 4.13):

У розділі Models 1/Models 2/Models 3 потрібно натиснути правою кнопкою миші на Materials і вибрати Blank Material.

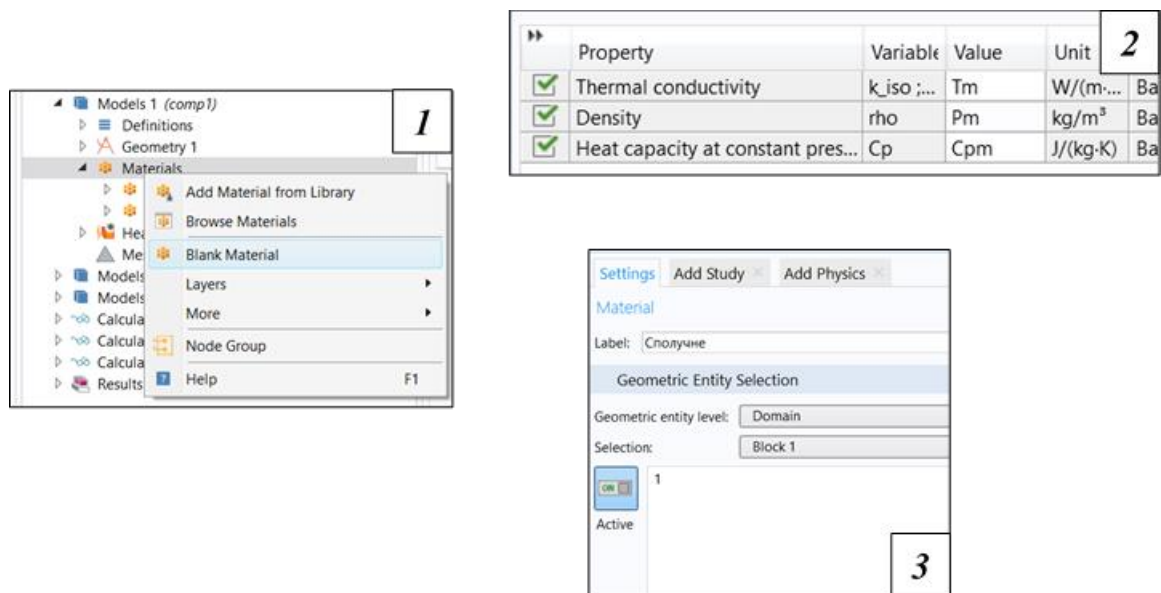


Рисунок 4.13. Створення матеріалу для компонентів композитної системи

У вікні Settings розділу Material задаємо властивості матеріалу. У матеріалі для теплового розрахунку обов'язкові фізичні величини такі як густина,

теплопровідність, теплоємність. Дані фізичних величин беремо з глобальних параметрів у вузлі Parameters.

Після створення матеріалу присвоюємо його до певного домену (частинка, сполучне).

4.3.5 Фізичний інтерфейс та граничні умови

Щоб задати граничні умови для розрахунку середнього теплового потоку комірки необхідно здійснити послідовність наведених операцій (рис. 4.14).

У розділі Models 1/Models 2/Models 3 натиснути правою кнопкою миші на Heat Transfer in Solids, щоб розкрити вкладку.

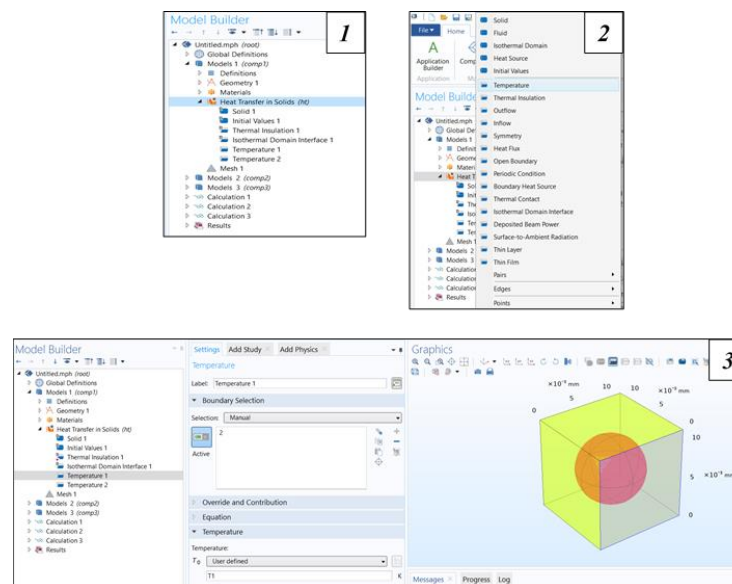


Рисунок 4.14 – Задання граничних умов для розрахунку середнього теплового потоку комірки

Натиснути правою кнопкою миші на Heat Transfer in Solids і вибрати Temperature (провести дію 2 рази).

У вікні Settings для Temperature 1 вибираємо грань куба та встановлюємо T_1 . Для Temperature 2 вибираємо протилежну грань куба та встановлюємо T_2 . Дані T_1 , T_2 беремо з глобальних параметрів у вузлі Parameters.

4.3.6 Створення сітки (Mesh)

Налаштування вузла Mesh задає роздільну здатність сітки кінцевих елементів, яка використовується для дискретизації моделі. Щоб створити сітку необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче:

У Model Builder в розділі Models 1/Models 2/Models 3 вибрати Mesh 1. У вікні налаштувань сітки у розділі Mesh Settings вибираємо типорозмір Finer зі списку Element size (рис. 4.15).

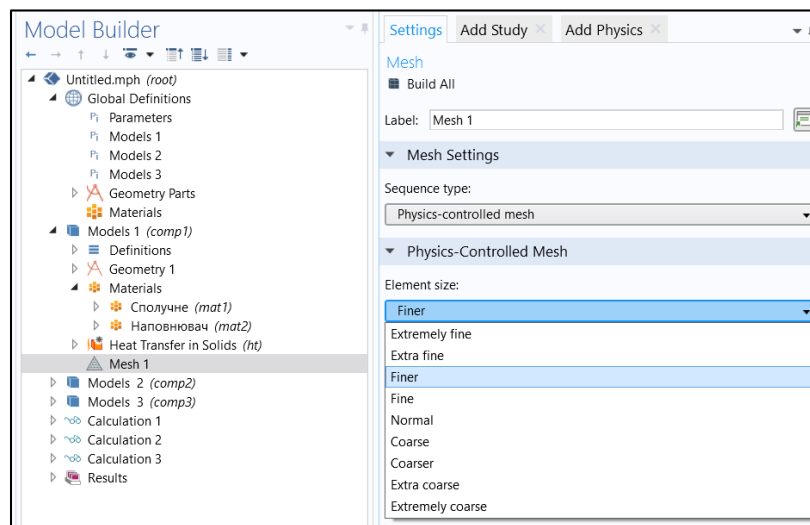
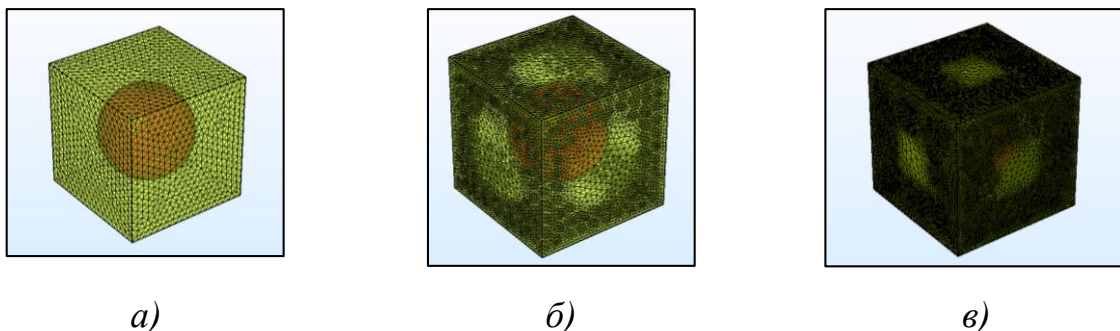


Рисунок 4.15 – Вікно налаштування сітки

Натискаємо кнопку Build All у вікні налаштувань або на панелі інструментів Mesh.

Через кілька секунд сітка з'явиться у вікні Graphics (рис. 4.16). Поверніть модель і подивіться на розподіл елементів і їх розміри.



а)

б)

в)

а) Модель 1, б) Модель 2, в) Модель 3

Рисунок 4.16 – Результат створення сітки:

4.3.7 Дослідження (Study)

На першому етапі налаштування моделі було вибрано дослідження Stationary, для якого використовується стаціонарний вирішувач так як температура і тепловий потік не залежить від часу.

Для запуску вирішувача необхідно натиснути правою кнопкою миші на Study 1 (перейменоване на Calculation 1/ Calculation 2/ Calculation 3) та вибрати Compute (або натисніть F8) (рис. 4.17)

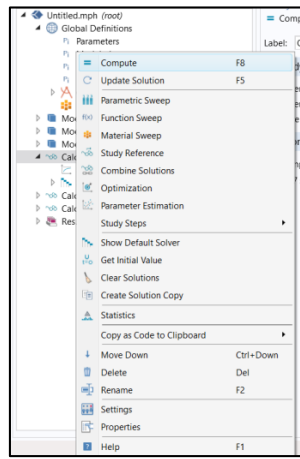
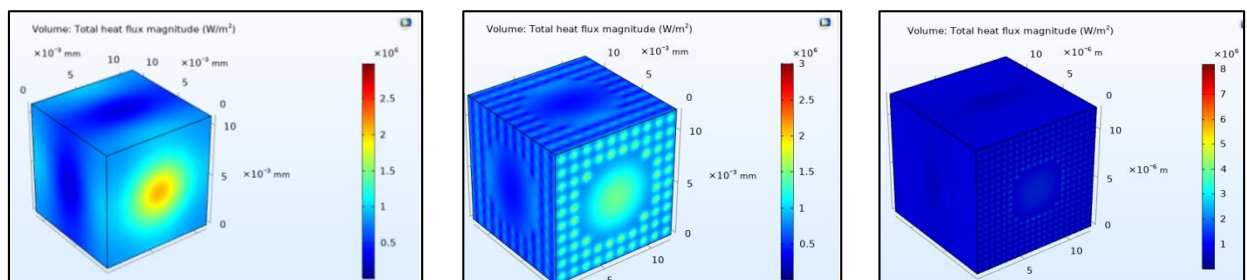


Рисунок 4.17 – Запуск розрахунку моделі

Через кілька секунд обчислень у вікні Graphics з'явиться графічний результат протікання теплового потоку через комірку (рис. 4.18).



a)

б)

в)

a) Модель 1, *б)* Модель 2, *в)* Модель 3

Рисунок 4.18 – Графічний результат протікання теплового потоку через комірку

4.3.8 Результати (Results)

Після розрахунку моделі результат відображається у вікні Graphics у вигляді графіка типу Volume 1 (рис. 4.18).

Щоб подивитися результат розрахунку середнього теплового потоку і ефективну теплопровідність комірки необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче (рис. 4.19):

- натиснути правою кнопкою на Derived Values розкрити Average та вибрати Volume Average;
- у вікні Settings для Volume Average вибираємо Selection > All domain;
- у вікні Settings для Volume Average вибираємо Replace Expression > Models 1/ Models 2/ Models 3 > Heat Transfer in Solids > Domain fluxes > ht.tfluxMag – Total heat flux magnitude;
- у вікні Settings для Volume Average у стовбці таблиці Expression вводимо $(ht.tfluxMag * L_{1,2,3}) / (T_1 - T_2)$;
- натискаємо на Evaluate;
- отримуємо результат середнього теплового потоку і ефективної теплопровідності комірки який відображається в Table.

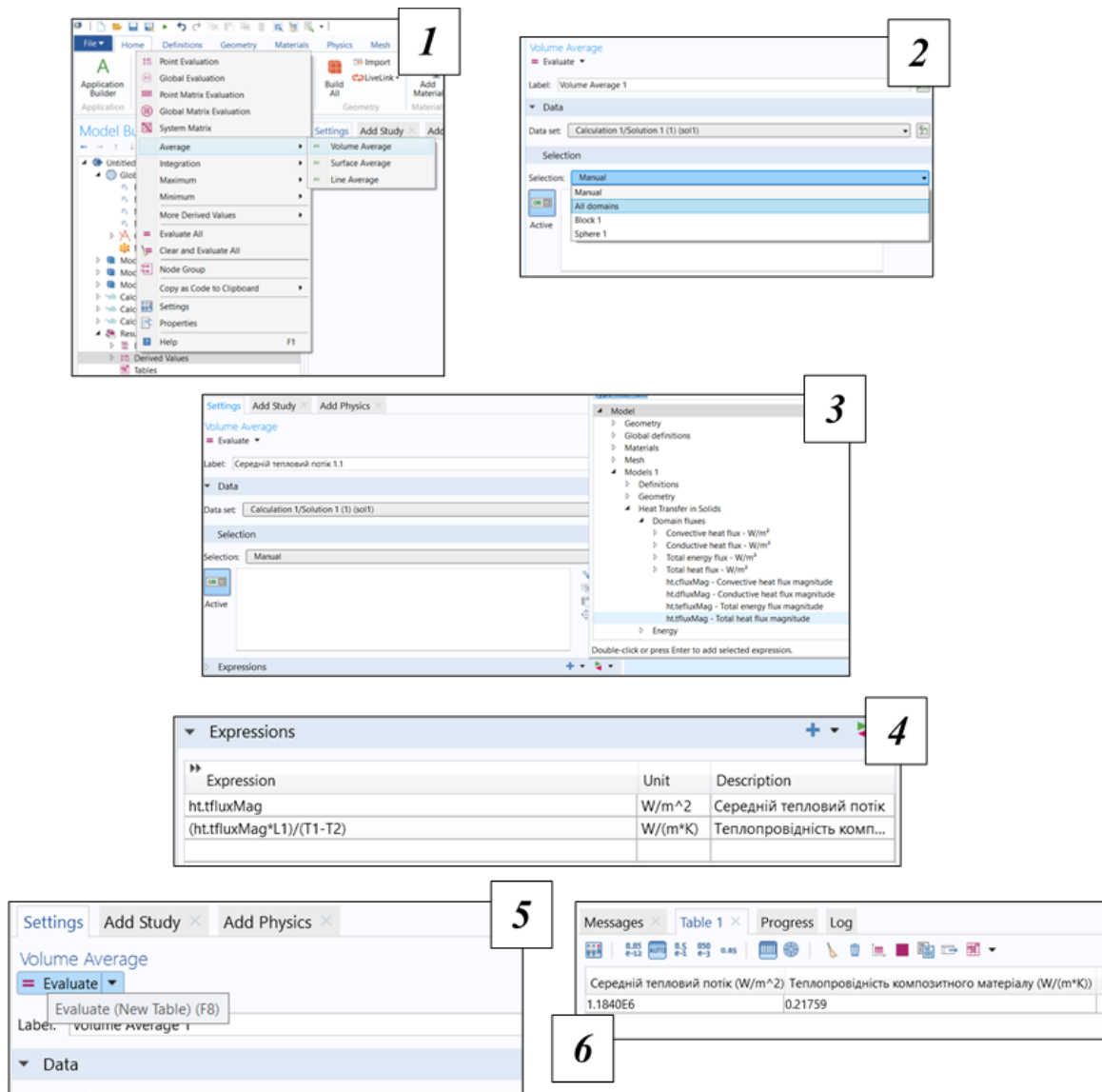


Рисунок 4.19 – Результат розрахунку середнього теплового потоку і ефективної теплопровідності комірки

4.3.9 Створення автоматизованої програми для розрахунку ефективної теплопровідності в середі розробки програм в COMSOL MULTIPHYSICS

Для того щоб створити автоматизовану програму яка полегше роботу користувача для розрахунку ефективної теплопровідності тонких поліімідних композиційних теплопровідних плівок зі складною структурою в програмі COMSOL MULTIPHYSICS необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче

Натискаємо в панелі інструментів на Application Builder щоб перейти в середу розробки програм (рис. 4.20).

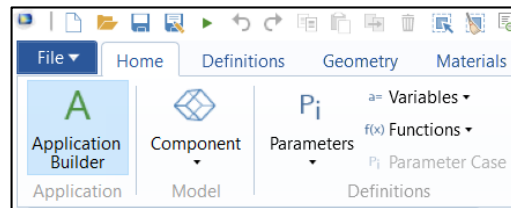


Рисунок 4.20 – Перехід в середу розробки програм

Натискаємо New Form щоб створити інтерфейс програми (рис. 4.21).

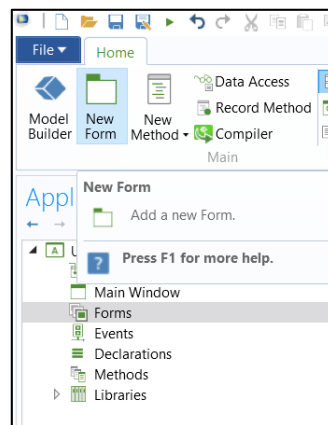


Рисунок 4.21 – Перехід для створення інтерфейса програми

Заходимо у вкладку Inputs/outputs і вибираємо величини.

Величини вводу:

- розмір частинки d_1, d_2, d_3 ;
- температуру T_1, T_2 ;
- густину сполучного та наповнювача;
- теплопровідність сполучного та наповнювача;
- теплоємність сполучного та наповнювача.

Величини виводу:

- середній тепловий потік комірки Моделі 1, Моделі 2, Моделі 3;
- теплопровідність комірки Моделі 1, Моделі 2, Моделі 3.

Натискаємо на Add Selected (рис. 4.22).

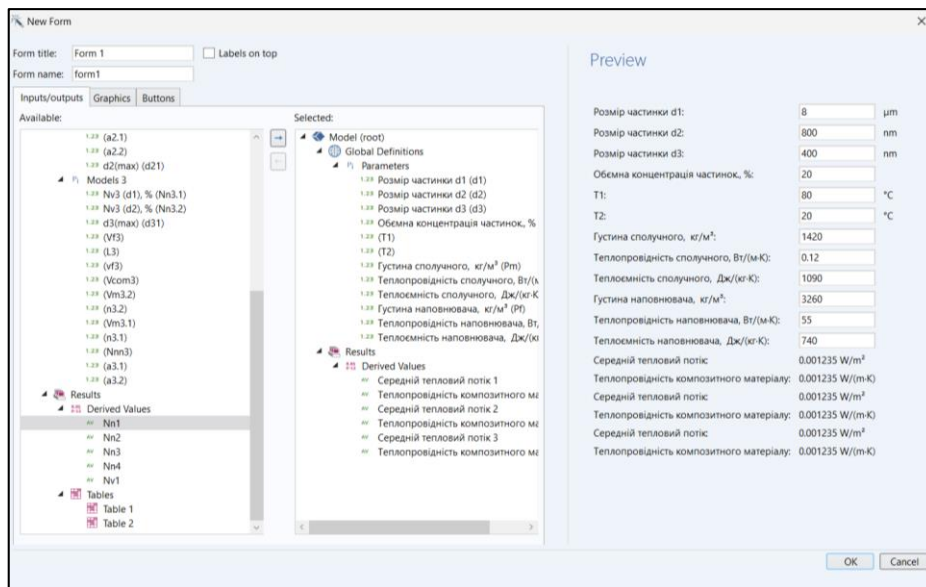


Рисунок 4.22– Вікно додавання величин вводу і виводу в інтерфейс програми

Заходимо у вкладку Graphics і додаємо графічні вікна Temperature (ht), Temperature (ht2), Temperature (ht3). Натискаємо на Add Selected (рис. 4.23).

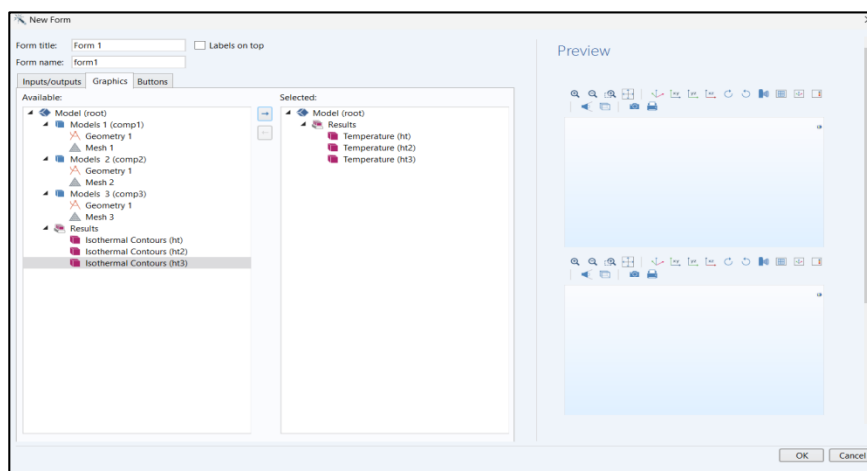


Рисунок 4.23 – Додавання графіка результатів в інтерфейс програми

Заходимо у вкладку Buttons і додаємо кнопку Compute Calculation 1, Compute Calculation 2, Compute Calculation 3. Натискаємо на Add Selected (рис. 4.24).

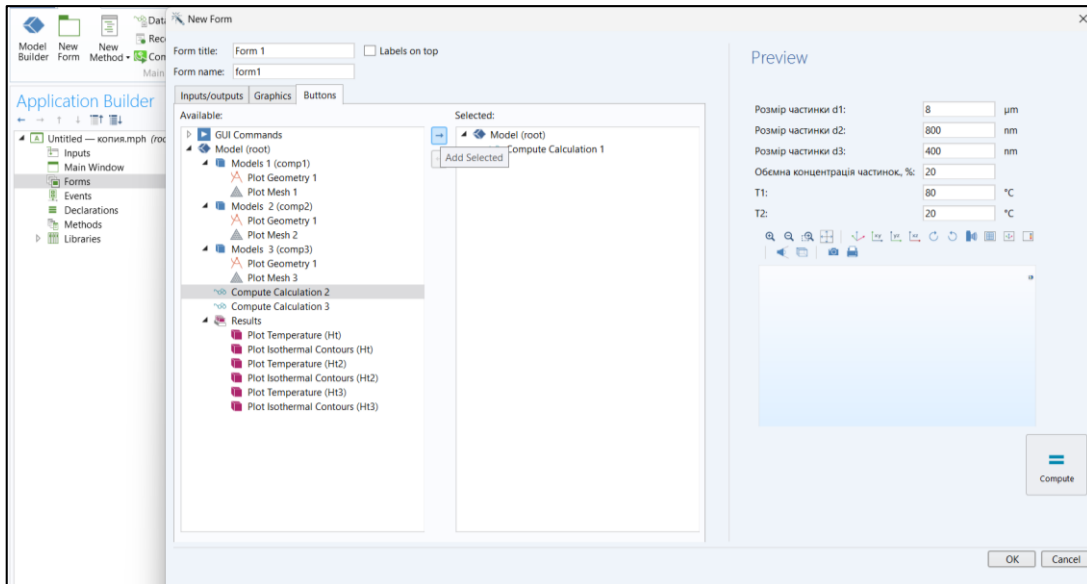


Рисунок 4.24 – Вікно додавання кнопки розрахунку в інтерфейс програми

Натискаємо ОК.

Натискаємо в панелі інструментів на Test Application щоб провести тест програми (рис. 4.25). Після натискання на Test Application відкривається Form (інтерфейс програми) (рис. 4.26).

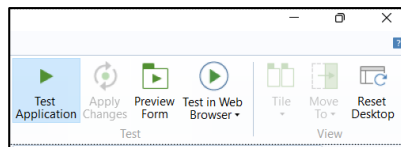


Рисунок 4.25 – Перехід к тесту програми

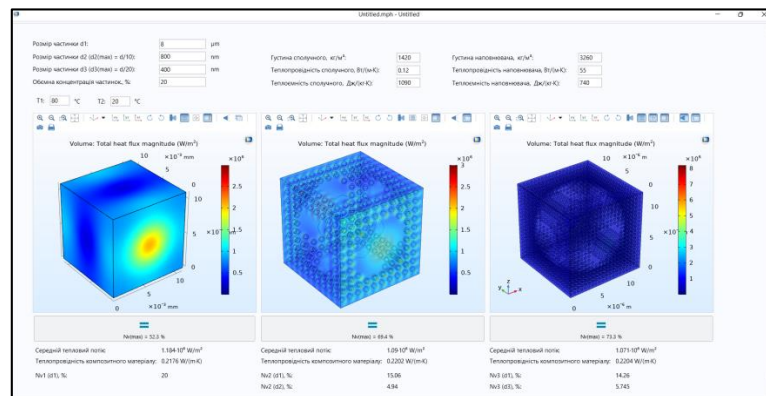


Рисунок 4.26 – Інтерфейс програми

4.3.10 Інструкція по розрахунку середнього теплового потоку і ефективної теплопровідності комірки в автоматизованій програмі (Form).

Для розрахунку середнього теплового потоку і ефективної теплопровідності комірки в автоматизованій програмі (Form) необхідно здійснити послідовність операцій, наведених нижче (рис. 4.27):

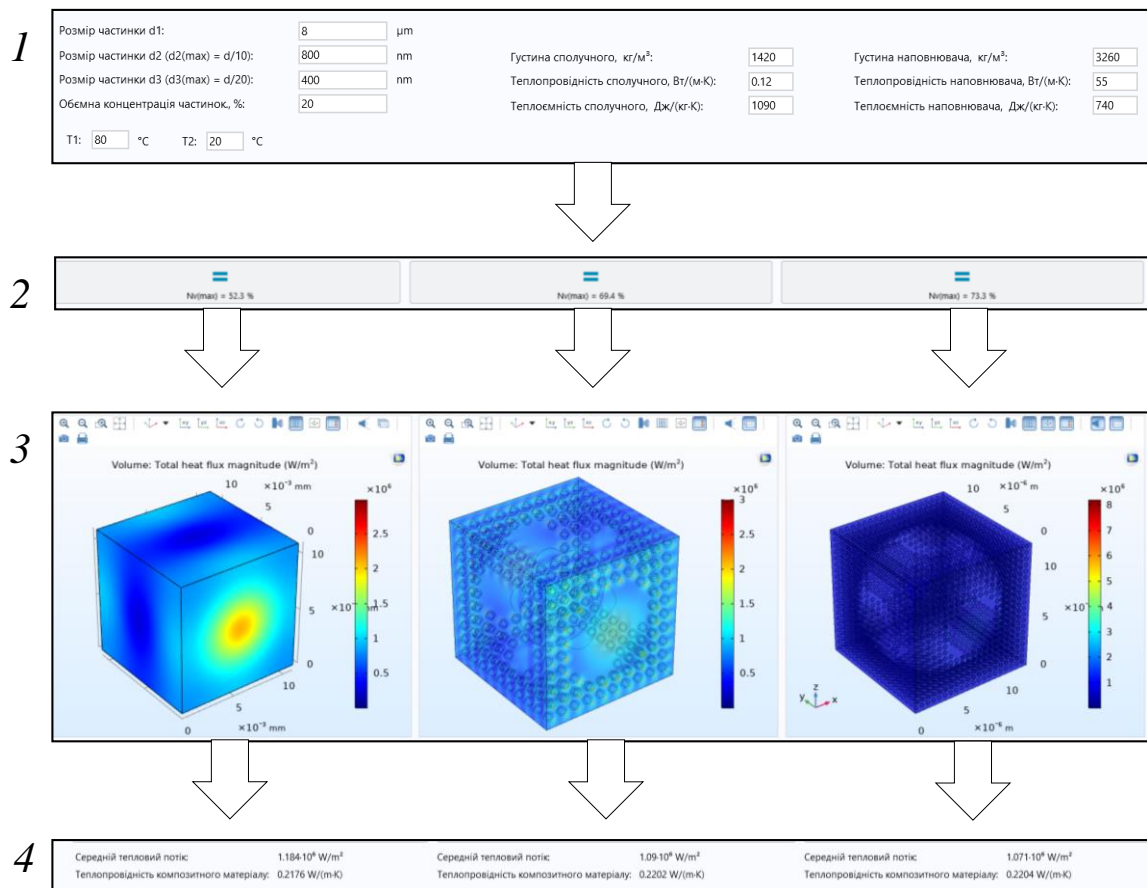


Рисунок 4.27 – Послідовність розрахунку середнього теплового потоку і ефективної теплопровідності комірки в автоматизованій програмі (Form)

Вводимо дані.

Натискаємо кнопку.

У вікні Graphics отримуємо графік розподілу теплового потоку в комірці Моделі 1, Моделі 2, Моделі 3.

У панелі виводу отримуємо результат середнього теплового потоку і ефективної теплопровідності комірки.

4.4 Охорона праці

Місце заходів з охорони праці на підприємстві відіграє особливо важливе значення в плані соціально - економічного розвитку підприємства, оскільки дозволяє захистити працівників від різних несприятливих факторів, що впливають на їх здоров'я і життєдіяльність, а також дозволяє запобігти настанню нещасних випадків і аварій і тим самим економити кошти на ліквідацію їх наслідків.

Охорона праці - це система правових, соціально-економічних, організаційно - технічних, санітарно - гігієнічних і лікувально-профілактичних заходів та засобів, спрямованих на збереження здоров'я і працездатності людини в процесі праці.

Основні положення на підприємстві з охорони праці містять такі законодавчі акти:

- Конституція України,
- Закони України «Про охорону праці».

Цей Закон визначає основні положення щодо реалізації конституційного права працівників на охорону їх життя і здоров'я в процесі трудової діяльності, на належні, безпечні і здорові умови праці, регулює за участю відповідних органів державної влади відносини між роботодавцем і працівником з питань безпеки, гігієни праці та виробничого середовища і встановлює єдиний порядок організації охорони праці в Україні.

Закони України «Про охорону здоров'я»

Цей закон визначають правові, організаційні, економічні та соціальні основи охорони здоров'я в Україні, регулюють суспільні відносини у цій галузі, з метою забезпечення гармонійного розвитку фізичних і духовних сил, високої працездатності і довголітнього активного життя громадян, усунення факторів, що шкідливо впливають на їх здоров'я, запобігання захворюваності, інвалідності, смертності, зниження їх рівня і поліпшення спадковості.

Закону України «Про пожежну безпеку»

Забезпечення пожежної безпеки є невід'ємною частиною державної діяльності щодо охорони життя та здоров'я людей, національного багатства і навколишнього природного середовища. Цей Закон визначає загальні правові, економічні та соціальні основи забезпечення пожежної безпеки на території України, регулює відносини державних органів, юридичних і фізичних осіб у цій галузі незалежно від виду їх діяльності та форм власності.

Закон України «Про охорону навколишнього середовища»

Завданням законодавства про охорону навколишнього природного середовища є регулювання відносин у галузі охорони, використання і відтворення природних ресурсів, забезпечення екологічної безпеки, а так само запобігання та ліквідації негативного впливу господарської та іншої діяльності на навколишнє середовище, збереження природних ресурсів, генетичного фонду живої природи, ландшафтів та інших природних комплексів, унікальних територій та природних об'єктів, пов'язаних з історико-культурною спадщиною.

4.4.1 Пожежна безпека

Усі працівники при прийнятті на роботу і щорічно за місцем роботи проходять інструктажі з питань пожежної безпеки відповідно до Типового положення. Протипожежні інструктажі з призначенням і терміном проведення поділяються на вступні і на робочому місці: первинний, повторний, позаплановий та цільовий.

Вступний протипожежний інструктаж проводиться за програмою, затвердженою головним інженером підприємства, з усіма особами, знову прийняті на постійну чи тимчасову роботу, а також прибули у відрядження або на практику і мають брати безпосередню участь у виробничому процесі. Цей інструктаж проводиться в спеціально обладнаному приміщенні головним інженером з охорони праці.

Первинний протипожежний інструктаж проводиться безпосередньо на робочому місці до початку виробничої діяльності працівників або участі прибулих на підприємство людей у виробничому процесі, ремонтних та інших

роботах. Програма цього інструктажу затверджується інженером з охорони праці.

Повторний протипожежний інструктаж, який включає питання вступного та первинного інструктажів проводиться на робочому місці з усіма працівниками не рідше одного разу на рік.

Позаплановий протипожежний інструктаж проводиться індивідуально або з групою працівників на робочому місці або в спеціально відведеному приміщенні в наступних випадках: введення в дію нових або доопрацьованих нормативних актів (правил, інструкцій і т.п.) з питань пожежної безпеки, зміни технологічного процесу, застосування нового або модернізація існуючого пожежонебезпечного устаткування; вимога державних інспекторів з пожежного нагляду, якщо встановлено незадовільне знання працівниками правил пожежної безпеки на робочому місці, невміння діяти при пожежі і користуватися первинними засобами пожежогашіння. Обсяг і зміст цього інструктажу визначаються причинами, що викликали необхідність його проведення.

Цільовий протипожежний інструктаж проводиться з працівниками перед виконанням ними разових (тимчасових) пожежонебезпечних робіт (зварювальних, що розігривають і ін.), при ліквідації аварії, наслідків стихійного лиха.

4.5 Висновки до експериментального дослідження

В цьому розділі проведено експериментальне дослідження методу прямого моделювання поліімідних композиційних структур з урахуванням граничних та початкових умов. Основна увага зосереджена на розробці та використанні програми для розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композитів. Використано програмний комплекс COMSOL MULTIPHYSICS для моделювання та розрахунків теплопровідності. Експериментальні дані підтверджують теоретичні розрахунки, демонструючи вплив розміру частинок

наповнювачів та їх об'ємної концентрації на теплопровідні властивості поліімідних композитів. Написана основна інформація з охорони праці.

ВИСНОВКИ

В ході виконання магістерської роботи було розроблено та написано програму «Теплопровідність поліімідного композиту ТсРС», яка дозволяє автоматизувати процеси розрахунку коефіцієнтів теплопровідності для поліімідних композитних матеріалів за аналітичною моделлю Бургера та моделлю перколяції, розроблена інструкція, яка детально описує процес застосування програми «Теплопровідність поліімідного композиту ТсРС» для розрахунку ефективної теплопровідності поліімідних композиційних теплопровідних плівок, яка допоможе користувачу спрогнозувати ефективну теплопровідність поліімідних композиційних теплопровідних плівок за моделлю Бургера та перколяції, розроблено структурні моделі та проведено чисельне моделювання теплопровідності композитних матеріалів при введенні в поліімідну матрицю високотеплопровідних частинок порошкових наповнювачів із SiO_2 , SiC , Al_2O_3 , AlN , з урахуванням граничних та початкових умов за допомогою програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS. Автоматизований процес розрахунку ефективної теплопровідності композитних матеріалів зі складною структурою в середі розробки програм в COMSOL MULTIPHYSICS, розроблена інструкція, яка детально описує процес застосування програмного комплексу COMSOL MULTIPHYSICS для розрахунку середнього теплового потоку та ефективної теплопровідності тонких поліімідних композиційних теплопровідних плівок зі складною структурою, яка допоможе користувачу з моделюванням комірок поліімідної композиційної теплопровідної плівки з рівномірним розташуванням частинок та автоматизувати розрахунки ефективної теплопровідності композиту за допомогою програмного середовища.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Положення про кваліфікаційну роботу здобувача вищої освіти на другому (магістерському) рівні [Електронний ресурс] : Наказ ХНУРЕ від 06 травня 2021 р. № 143. – Режим доступу : https://nure.ua/wp-content/uploads/Main_Docs_NURE/143-vid-06.05.2021-pro-vvedennja-v-diju-rishennja-vchenoiradi-universitetu.pdf.
2. ДСТУ 3008: 2015. Інформація та документація. Звіти у сфері науки і техніки. Структура і правила оформлення. К.: ДП “УкрНДНЦ”. 2016. 30 с.
3. XII International Scientific Conference “Functional Basis of Nanoelectronics” / O.M. Listratenko, O.V. Kravchenko, I.V. Borshchov // September 7-10, 2021, Odesa, Ukraine. Доповідь: Modelling the structures of polyimide composite systems and calculating their thermal conductivity coefficients.
4. «Structural modeling and calculation of thermal conductivity of polyimide composite materials» / V.M. Borshchov, O.M. Listratenko, M.A. Protsenko, I.T. Tymchuk, O.V. Kravchenko, O.V. Syddia, I.V. Borshchov, M.I. Slipchenko, // Radiotekhnika : All-Ukr. Sci. Interdep. Mag. 2022. №211. P. 146– 155.
5. «Combined heat transfer boards with polyimide dielectrics» / V.M. Borshchov, O.M. Listratenko, M.A. Protsenko, I.T. Tymchuk, O.V. Kravchenko, O.V. Syddia, I.V. Borshchov, M.I. Slipchenko, // Radiotekhnika : All-Ukr. Sci. Interdep. Mag. 2023. №000. P. 00 – 00.
6. Yoo, Y. Thermal conductive carbon filled polymer composites / Y. Yoo [et al.] // Proc. 18th Intern. Conf. Comp. Mat. Korea, August 21-26. – 2011. – P. 3–20.
7. A. Krivatkin, Yu. Saunenko, Heat-dissipating plastics - a challenge to aluminum, Semicond. light. technol. 2010. № 1. p. 54–56 [in Russian].
8. Yung, K.C. Effect of AlN content on the performance of brominated epoxy resin for printed circuit board substrate / K.C. Yung [et al.] // Polym. Sci. B: Polym. Phys. – 2007. – V. 43, № 13. – P. 1662–1674.
9. Khumalo, V.M. Polyethylene/synthetic boehmite alumina nanocomposites: Structure, thermal and rheological properties / V.M. Khumalo, J. Karger-Kocsis, R. Thomann // Express Polymer Letter – 2010. – V. 4, № 5. – P. 264–274.

10. Han, Z. Thermal conductivity of carbon nanotubes and their polymer nanocomposites : a review / Z. Han, A. Fina // *Progress in Polymer Science* – 2011. – V. 36, № 7. – P. 914–944.

11. V. Kosnyrev, Thermal Conductive Materials of the Bergquist Company, *Power Electron.* 2008. № 2. p. 118–122.

12. Piao, M. Preparation and characterization of expanded graphite polymer composite films for thermoelectric applications / M. Piao [et al.] // *Physica Status Solidi (b)* – 2013. – V. 250, № 12. – P. 2529–2534.

13. Lebedev, S.M. Novel polymeric composites with nonlinear current-voltage characteristic / S.M. Lebedev, O.S. Gefle, A.E. Strizhkov // *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* – 2013. – V. 20, № 1. – P. 289–295.

14. Wang, X. Large-surface-area BN nanosheets and their utilization in polymeric composites with improved thermal and dielectric properties / X. Wang [et al.] // *Nanoscale Research Letters* – 2012. – V. 7. – P. 662–669.

15. A.S. Egorov, et al., Investigation of the processes of modification of polyimide systems intended for the creation of composite multilayer materials, *Plastic masses.* 2019. № 5-6. p. 6-8 [in Russian].

16. Yanfei Xu, Xiaoxue Wang, Jiawei Zhou, Bai Song, Zhang Jiang, Elizabeth M. Y. Lee, Samuel Huberman, Karen K. Gleason, Gang Chen. Molecular engineered conjugated polymer with high thermal conductivity // *Science Advances.* 2018.

17. L.K. Oliferov, Mechanochemical synthesis of functional nanostructured polymer-based composites, *Dis. Ph.D.* (2016), p. 154.

18. Бондалетова, Л.І. Полімерні композиційні матеріали (частина 1): навчальний посібник/Л.І. Бондалетова, В.Г. Бондалетов. - Томськ: Вид-во Томського політехнічного університету, 2013. - 118 с.

19. Thermal conductivity of carbon nanotube and hexagonal boron nitride polymer composites. / Tabkh Paz Majid, Shajari Shaghayegh, Mahmoodi Mehdi, Park Dong-Yeob, Suresh Hamsini, Park Simon S. // *Composites. B.* 2016. 100. P. 19-30.

20. Synergetic effect of thermal conductive properties of epoxy composites containing functionalized multi-walled carbon nanotubes and aluminum nitride / Teng

Chih-Chun, Ma Chen-Chi M., Chiou Kuo-Chan, Lee Tzong-Ming // Composites. B. 2012. 43. № 2. P. 265-271.

21. E.A. Nikolaeva, A.N. Timofeev, K.V. Mikhailovsky, Methods for increasing the thermal conductivity coefficients of polymers and polymer composite materials. Information technology bulletin. 2018; 15 (1): 156-168.

22. B.A. Zhubanov, et al., Thermophysical properties of alicyclic polyimide, Chem. J. of Kazakhstan. №3. 2014. p. 15-24.

23. Міхєєв М.О., Міхєєва І.М. / Основи теплопередачі -1976р. - 345 с.

24. Дульнєв, Г.М. Теплопровідність сумішей та композиційних матеріалів: довідкова книга / Г.М. Дульнєв, Ю.П. Зарічняк. - Л.: Енергія, 1974. - 264 с.

25. Чуднівський, А.Ф. Теплофізичні характеристики дисперсних матеріалів/А.Ф. Чуднівський; ред. Л.І. Орлова. - М.: Фізматгіз. 1962. - 456 с.

26. Шевченка В.Г. Основи фізики полімерних композиційних матеріалів: навчальний посібник/В.Г. Шевченка. - М.: МДУ, 2010. - 98 с.

27. Міхєєв В. А., Сулаберідзе В. Ш., Мушенко В. Д. Лінійна модель теплопровідності дисперсних матеріалів на основі полімерних сполучних // Изв. вишів. Приладобудування. 2017. Т. 60, № 3. С. 275-279.

28. Абизов А.М., Кідалов С.В., Шахов Ф.М. Теплопровідність композиту алмаз парафін // Фізика твердого тіла. 2011. том 53.-вип.1. З. 48-51.

29. Comsol Multiphysics [Електронний ресурс] // Режим доступу: <https://comsol.com>.

30. Roger W. Pryor . Introduction to Comsol Multiphysics, 2019,pp.110-152.

31. Mehrzad Tabatabaian and Reza Avazpour. COMSOL for Engineers, 2014, pp. 159-164.

32. Patent RF No. 2600110 Heat-conducting electrically insulating composite material (variants) and method for its production., 2016.

33. Міхєєв В.А. Забезпечує якість нових функціональних матеріалів для теплопровідних покриттів на стадії розробки та виробництва. Дис. канд. техн. наук. - 2018. 173 с.

34. Міхєєв В. А., Сулаберідзе В. Ш., Мушенко В. Д. Моделювання теплопровідності трикомпонентних композицій // Изв. вишів. Приладобудування. 2016. Т. 59, № 7. С. 584-591.

35. Лебовка Н. І., Лисецький Л. Н., Соскін М. С. та ін. Перколяційні явища в анізотропних середовищах // Моделювання фізичних властивостей неупорядкованих систем: самоорганізація, критичні та перколяційні явища: матер. семінару. Астрахань: Вид. будинок "Астраханський університет", 2011. С. 5-22.

36. Кирилов В. Н., Дубінкер Ю. Б. та ін. Теплопровідність систем кремнійорганічний еластомер - порошкоподібний мінеральний наповнювач // ІФЖ. 1972. Т. XXIII, № 3.

37. Нікітін А. В. Чисельний метод розрахунку коефіцієнта теплопровідності наповнених полімерів / А. В. Нікітін, А. Ю. Бачуріна // Вісник Гродненського державного університету імені Янки Купали. Сер. Математика. фізика. інформатика, обчислювальна техніка та управління. 2011. С. 106-111.

38. Нікітін Д.А. Моделювання структури композиційних систем та розрахунок їх коефіцієнта теплопровідності // Матеріали. Технології. Інструменти. 2004. Т. 9, № 2. С. 11-15.

39. Бачуріна А.Ю., Нікітін А.В. Чисельний метод розрахунку коефіцієнта теплопровідності композиційної системи//Вісник Гродн. держ. ун-ту. Сер. 2, Математика. фізика. Інформатика, обчислювальна техніка та управління. Біологія 2010. №2. С.93-99

40. Степанов В.В. Петреня Ю.К., Андрєєв А.М., Костельов А.М., Маннанов Е.Р., Талалов В.А. Вплив властивостей компонентів на ефективну теплопровідність полімерних композитних матеріалів // Науково-технічні відомості СПбГПУ. Фізико-математичні науки. 2018. Т. 11. № 4. С. 85-94. DOI: 10.18721/JPM.11408.

41. Теплопровідна поліімідна плівка DuPont™ Kapton® MT, <https://www.dupont.com/products/kapton-mt.html> // офіційний сайт (дата звернення 08.04.2023).

42. Теплопровідна поліімідна плівка DuPont™ Kapton® MT +, <https://www.dupont.com/products/kapton-mt-plus.html>. // офіційний сайт (дата звернення 08.04.2023).

43. Борщов І., Новоселов С. РОЗРОБКА ПРОГРАМИ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦІЇ ПРОЦЕСУ РОЗРАХУНКУ ЕФЕКТИВНОЇ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ НОВИХ ПОЛІІМІДНИХ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ. *UNIVERSUM* / Грудень 2023, 3, 2023. С. 114–126. URL: <https://archive.liga.science/index.php/universum/article/view/613>.