DOI: 10.7242/1999-6691/2017.10.1.1 УДК 537.2, 537.8

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИСПЕРСНО-НАПОЛНЕННОГО КОМПОЗИТА

П.А. Люкшин¹, Н.Ю. Гришаева^{1,2}, Б.А. Люкшин^{1,2,3}, С.В. Панин^{1,4}, С.А. Бочкарева^{1,2}, Н.Ю. Матолыгина¹, Г.Е. Уцын^{2,4}

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Российская Федерация ²Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Российская Федерация ³Национальный исследовательский Томский государственный университет, Российская Федерация ⁴Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Российская Федерация

Полимерные материалы позволяют относительно просто менять их свойства с помощью структурной модификации, а именно за счет введения наполнителей различной природы. При этом химическая природа полимерной матрицы получаемой композиции не затрагивается, а свойства, в том числе деформационно-прочностные, теплофизические и электрофизические, могут заметно отличаться от исходных. В работе обсуждается такой способ определения эффективных электрофизических характеристик неоднородных материалов, использование которого возможно и в тех случаях, когда материал в разных фазах имеет свойства, отличающиеся на несколько порядков. Рассматриваются композиции, состоящие из полимерных матриц, наполненных порошковыми электропроводящими материалами. Формулировка краевых задач электростатики и электропроводности для ячейки периодичности композиционного материала основывается на фундаментальных соотношениях электрофизики. Составляющими математической модели являются дифференциальные уравнения в частных производных, которые решаются методом конечных элементов (МКЭ). В результате находятся поля потенциала и напряженности электрического поля. Сопоставлением интегральных характеристик (энергии электромагнитного поля, мощности тепловых потерь) ячейки периодичности композита и гипотетического однородного материала устанавливаются эффективные электрофизические характеристики композитного материала: диэлектрическая проницаемость и удельная электрическая проводимость. В качестве примеров анализируются электрофизические свойства нескольких композиций, в частности, композиции из полиэтилена (матрица), наполненного порошком металла (армирующие включения). Кроме того проводится сравнение численных и экспериментальных результатов для композиций из силикона, наполненных графитом и медью.

Ключевые слова: расчет эффективных характеристик, электрофизические свойства, дисперсно-наполненный материал, композиционный материал, диэлектрическая проницаемость, электрическая проводимость

CALCULATION OF THE ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF DISPERSED-FILLED COMPOSITES

P.A. Lyukshin¹, N.Yu. Grishaeva^{1,2}, B.A. Lyukshin^{1,2,3}, S.V. Panin^{1,4}, S.A. Bochkareva^{1,2}, N.Yu. Matolygina¹ and G.E. Uzin^{2,4}

¹Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russian Federation ²Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russian Federation ³National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation ⁴National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation

The properties of polymeric materials can be relatively easily changed during structural modifications by introducing fillers of different nature. Meanwhile, the chemical nature of the polymeric matrix of the resulting composition remains unchanged, whereas the thermophysical and electrophysical properties of the composition, including its strain-strength characteristics, can be markedly different from the properties of the matrix. This paper considers the method of determining the effective electrophysical characteristics of inhomogeneous materials when different material phases have properties that differ by several orders of magnitude. The compositions of polymer matrices filled with electrically conducting powder materials are investigated. Electrostatic and electrophysics. Partial differential equations used in the mathematical model of the material in an electric field are solved by the finite element method (FEM). Analysis of the results makes it possible to evaluate the electric constant and specific electric conductivity are obtained by comparing the integral characteristics (electromagnetic field energy, heat loss power) of the periodicity cells of a composite and a hypothetical homogeneous material. As an example, the electrofield energy, heat loss power) of the periodicity cells of a composite based on polyethelene (matrix) filled with metal powder (reinforced particles), are considered. In addition, a comparison of the numerical and experimental results for the silicone-based compositions filled with graphite and copper is performed.

Key words: numerical calculation of effective characteristics, electrophysical properties, dispersed-filled material, composite material, dielectric constant, electrical conductivity

1. Введение

Взаимосвязь структуры и электрофизических свойств композита является важным аспектом физики композиционных материалов. В работах [1–3] обсуждались методы определения эффективных деформационно-прочностных и теплофизических характеристик дисперсно-наполненных композиций с полимерными матрицами. Суть исследований с использованием этих методов заключалась в анализе

© П.А. Люкшин, Н.Ю. Гришаева, Б.А. Люкшин, С.В. Панин, С.А. Бочкарева, Н.Ю. Матолыгина, Г.Е. Уцын, 2017

отклика относительно небольшого объема материала (представительного объема) на силовые и/или температурные воздействия. С использованием методов осреднения или посредством приведения в соответствие отклика представительного объема на внешние воздействия и отклика модельной однородной среды получались эффективные характеристики материала.

С одной стороны, такой подход дает возможность изучать как состояние представительного объема с учетом структурных элементов, образующих композит, так и физические процессы, происходящие в неоднородном материале. В частности, в соответствующие модели удается включить описание таких процессов и факторов как локализация деформаций, концентрация напряжений, разные уровни теплоемкости и теплопроводности фаз, наличие или отсутствие адгезии, наличие межфазных слоев и их свойств. С другой стороны, полученные эффективные характеристики можно более обоснованно включать в расчет параметров напряженно-деформированного и/или теплофизического состояния изготовленных из этих композитов изделий. В целом эту же схему предлагается применять для определения электрофизических характеристик материала. Единый подход к вычислению эффективных теплофизических, деформационно-прочностных и электрофизических характеристик композиций позволяет явным образом учитывать структуру материала, что важно при оценке одновременно электрических, теплофизических и деформационно-прочностных свойств.

Существует большое количество эмпирических, полуэмпирических методов расчета электрической проводимости и диэлектрической проницаемости полимерных композиционных материалов [4–12]. Каждый из них имеет ограничения, которые касаются или геометрии включений, или кристаллографической текстуры, или отличий величин диэлектрических проницаемостей матрицы и включений, или другого [12–14].

Вычисление проводимости образца с включениями возможно с помощью приближения Максвелла [4] или усовершенствованного приближения Максвелла [15]. В случае, когда проводимость включений на порядки больше проводимости связующего при определенной степени наполнения, обуславливающей близость к порогу протекания (к критической области), эффективная проводимость находится в результате этих приближений с большой погрешностью.

Применяются также приближения эффективной среды [6, 11, 16, 17] в виде формул Бруггемана, Ландауера–Бруггемана, Максвелла–Гарнетта, Мак-Лахлана и других, в которые входят усредненные характеристики фаз. Каждое из приближений является более или менее точным в конкретных условиях. Так, известная теория вычисления эффективной диэлектрической проницаемости композиционного материала — теория Максвелла–Гарнетта [6, 14] — описывает материалы ниже порога перколяции. Теория Бруггемана (одна из теорий эффективной среды) хорошо отображает электропроводность вблизи порога протекания [5]. Тем не менее, формула носит ограниченный характер, так как основывается на усреднении полей по объему, и в ней не учитывается внутренняя геометрия неоднородного материала.

Теорией, позволяющей принимать во внимание пороговое поведение зависимости удельного электрического сопротивления от концентрации наполнителя, является классическая теория перколяции (percolation theory) [7, 8]. В работе [18] предложены феноменологические уравнения для электропроводности микронеоднородных материалов. Эти уравнения базируются на идеях эффективной среды и теории перколяции, результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. В последнее время для описания электропроводности полимерных композитов часто применяются теория перколяции и фрактальный анализ [19, 20, 21].

Во многих работах проводятся исследования влияния геометрических размеров, концентрации включений на эффективную диэлектрическую проницаемость и электрическую проводимость методами математического моделирования и численными методами [22–27]. Из численных методов наиболее часто используется метод конечных элементов (МКЭ) [23, 25].

При описании механизма проводимости наноуглеродных композитов применяется «модель туннелирования» [24, 25]. В [25] находится распределение электрического потенциала и напряженности поля в композите металл-изолятор. Расчет электрического поля проведен на основе стационарных уравнений Максвелла методом конечных элементов. В результате расчета определяется проводимость и емкость элементарной ячейки композита. Следует отметить, что матрица системы линейных алгебраических уравнений, следующая из процедуры МКЭ, в отличие от метода, используемого ниже, несимметрична.

В [26] изложено нахождение проводимости композитов путем решения соответствующих дифференциальных уравнений методом конечных разностей. Используется неявный метод переменных направлений. Отмечается, что проводимости модельных структур, полученные аналитическими и численными методами, совпадают.

В работе [27] используется метод асимптотического осреднения — «метод гомогенизации», который берет начало в работах Н.С. Бахвалова и других авторов. Данный метод позволяет вычислять эффективные характеристики композитов с помощью решения специальных «локальных задач» на ячейках периодичности.

Таким образом, все вышеперечисленные методы расчета эффективных электрических характеристик имеют те или иные ограничения.

Ниже эффективные характеристики композита — диэлектрическая проницаемость и удельная проводимость — определяются исходя из сопоставления интегральных параметров электромагнитных полей композиционного неоднородного материала и эквивалентного однородного материала.

2. Моделирование электростатических полей. Вычисление эффективной диэлектрической проницаемости композиционных материалов (КМ)



Конечно-элементная сетка в ячейке периодичности композиционного материала приведена на рисунке 1. Электростатическое поле в расчетной области описывается уравнениями Максвелла [28, 29]

$$rot E = 0; \quad D = \varepsilon_a E; \quad div D = 0, \tag{1}$$

где E — напряженность поля, D — электрическое смещение, ε_a — абсолютная диэлектрическая проницаемость.

С использованием подстановки $E = -\text{grad } \phi$ третье уравнение системы (1) можно записать в виде:

$$\operatorname{div}(-\varepsilon_r \varepsilon_0 \operatorname{grad} \varphi) = 0, \qquad (2)$$

Рис. 1. Элементарная ячейка для композита с круговым включением

где ε_r — относительная диэлектрическая проницаемость материала, ε_0 — электрическая постоянная, φ — потенциал.

Если в пределах одного конечного элемента диэлектрическая проницаемость материала постоянна, то уравнение (2) принимает вид:

$$\varepsilon_r \varepsilon_0 \operatorname{div} \operatorname{grad} \varphi = 0.$$
 (3)

Введение обозначения div grad $\phi = \Delta^2 \phi$ позволяет преобразовать уравнение (3):

$$\varepsilon_r \varepsilon_0 \Delta^2 \phi = 0. \tag{4}$$

В итоге получается уравнение Лапласа (4) с переменными коэффициентами ε_r , так как в неоднородном материале свойства фаз отличаются.

На границе раздела двух диэлектриков (см. окружность на рисунке 1, показывающую границу контакта матрицы и включения) выполняются условия сопряжения, вследствие чего имеет место равенство потенциалов:

$$\varphi_1 = \varphi_2 \,. \tag{5}$$

Кроме этого, равны нормальные составляющие вектора электрического смещения

$$\varepsilon_{r_1} \frac{\partial \varphi_1}{\partial n} = \varepsilon_{r_2} \frac{\partial \varphi_2}{\partial n}.$$
 (6)

На границах расчетной области AB и CD (Рис. 1) задаются значения потенциала (условия Дирихле), например:

$$\varphi|_{AB} = -1, \qquad \varphi|_{DC} = 1. \tag{7}$$

На границах AD и BC ставятся условия второго рода (условия Неймана, или условия непротекания):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x}\Big|_{AD} = 0; \qquad \frac{\partial \varphi}{\partial x}\Big|_{BC} = 0. \tag{8}$$

Уравнение Лапласа (4) с граничными условиями (7, 8) описывает электростатическое поле в области ABCD, содержащей полиэтиленовую матрицу и металлические включения.

2.1. Метод решения

Решение уравнения Лапласа эквивалентно отысканию минимума функционала χ [29]:

$$\chi = \int_{V} \frac{1}{2} \left[\varepsilon_r \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \varepsilon_r \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right] dV.$$

Условие минимума функционала позволяет получить систему алгебраических уравнений

$$\frac{\partial \chi}{\partial \varphi_i} = \sum_{e=1}^n \left[k^{(e)} \right] \{ \varphi \} = 0$$

или

$$[K]\{\varphi\} = \{F\},\tag{9}$$

где [K] — глобальная матрица «жесткости»,

$$\left[K\right] = \sum_{e=1}^{n} \left[k^{(e)}\right].$$

Здесь $[k^{(e)}]$ — матрица «жесткости» одного элемента, $\{\phi\}$ — вектор-столбец неизвестных значений потенциала, $\{F\}$ — вектор «нагрузки» в задаче электростатики.

Матрица «жесткости» элемента в задачах электростатики представляется как

$$\left[k^{(e)}\right] = \int_{V^{(e)}} \left[B^{(e)}\right]^T \left[D^{(e)}\right] \left[B^{(e)}\right] dV,$$

где $[B^{(e)}]$ — матрица, содержащая производные функций формы, $[D^{(e)}]$ — матрица констант материала, $V^{(e)}$ — объем элемента. При этом матрица констант материала $[D^{(e)}]$ равна:

$$\begin{bmatrix} D^{(e)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_r \varepsilon_0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_r \varepsilon_0 \end{bmatrix},$$

а матрица $\begin{bmatrix} B^{(e)} \end{bmatrix}$ имеет вид:

$$\begin{bmatrix} B^{(e)} \end{bmatrix} = \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} b_i & b_j & b_k \\ c_i & c_j & c_k \end{bmatrix},$$

где A — площадь одного элемента, $b_i = y_i - y_k$, $c_i = x_k - x_i$. Коэффициенты b_j , b_k , c_j , c_k получаются круговой перестановкой индексов.

Таким образом, решение задачи электростатики сводится к решению системы уравнений (9) с условиями (7), (8), результатом решения является распределение потенциала φ в узлах сетки конечных элементов и напряженности в элементах.

Вычисления проводились на основе авторской программы, написанной на языке программирования Fortran.

2.2. Вычисление обобщенной диэлектрической проницаемости композиционного материала

Из условия равенства энергий электростатического поля в неоднородном КМ и поля в эквивалентном однородном материале получается эффективная диэлектрическая проницаемость композита ε_{reff} . Энергия электростатического поля неоднородного материала составляет

$$W_{_{33}} = \frac{1}{2} \int_{V} \varepsilon_R \varepsilon_0 E^2 dV .$$
 (10)

При расчетах электростатического поля МКЭ интеграл в (10) заменялся суммой:

$$W_{_{\mathfrak{I}\mathfrak{I}}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_{R}(i) \varepsilon_{0} E^{2}(i) \Delta V(i) .$$
⁽¹¹⁾

Здесь $\Delta V(i)$ — объем *i*-го конечного элемента. В формуле (11) относительная диэлектрическая проницаемость среды для каждого конечного элемента области ABCD (Рис. 1) принимала значения в зависимости от того, какой материал находился в соответствующем конечном элементе.

В случае однородного материала в формуле энергии электрического поля константы можно вынести за знак интеграла. Кроме того, известно распределение напряженности электрического поля, поэтому вычисление интеграла не представляет труда:

$$W_{_{\mathfrak{I}\mathfrak{I}}} = \frac{1}{2} \int_{V} \varepsilon_{RK} \varepsilon_{0} E^{2} dV = \frac{1}{2} \varepsilon_{RK} \varepsilon_{0} \int_{V} E^{2} dV = \frac{1}{2} \varepsilon_{RK} \varepsilon_{0} E^{2} \cdot V , \qquad (12)$$

где ε_{RK} — относительная (эффективная) диэлектрическая проницаемость однородного материала (композита).

В результате сравнения энергий электрического поля элементарной ячейки композита (11) и этой же ячейки некоторого гипотетического однородного материала (12) легко получается эффективная диэлектрическая проницаемость композита ε_{reff} :

$$\varepsilon_{reff} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_{R}(i) E^{2}(i) \Delta V(i)}{E^{2} \cdot V}, \qquad (13)$$

где $\varepsilon_R(i)$ — диэлектрическая проницаемость *i* -го конечного элемента, E(i) — напряженность в элементе. Эффективную емкость ячейки периодичности можно вычислить по формуле

$$C=2W_{\rm eff}/U^2\,,$$

где $W_{3\pi}$ — энергия электростатического поля, U — разность потенциалов на границах расчетной области.

Составляющие напряженности электрического поля находятся как производные потенциала ф по соответствующей координате:

$$E_{x} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{2A} \left(b_{i} \varphi_{i} + b_{j} \varphi_{j} + b_{k} \varphi_{k} \right),$$

$$E_{y} = -\frac{\partial \varphi}{\partial y} = -\frac{1}{2A} \left(c_{i} \varphi_{i} + c_{j} \varphi_{j} + c_{k} \varphi_{k} \right),$$

где

$$b_{i} = y_{j} - y_{k}, \quad b_{j} = y_{k} - y_{i}, \quad b_{k} = y_{i} - y_{j},$$

$$c_{i} = x_{j} - x_{k}, \quad c_{j} = x_{k} - x_{i}, \quad c_{k} = x_{i} - x_{j},$$

$$A = 0,5 \cdot (x_{j}y_{k} - x_{k}y_{j} - x_{i}y_{k} - x_{k}y_{j} - x_{i}y_{j} - x_{j}y_{i})$$

Напряженность электрического поля определяется соотношением:

$$E^2 = E_x^2 + E_y^2$$

Модуль напряженности электрического поля вычисляется по формуле:

$$\operatorname{mod}(E) = \sqrt{E}$$
.

2.3. Примеры тестовых расчетов

<u>Пример 1.</u> Требуется установить электростатическое поле расчетной области ABCD (Рис. 1). Материал матрицы — полиэтилен. В центре расчетной области находится круглое железное включение. На сторонах расчетной области ABCD ставятся граничные условия (7), (8). Для этой задачи имеются аналитические решения [28, 29].

Физические характеристики материалов следующие: относительная диэлектрическая проницаемость полиэтилена 2,2; диэлектрическая проницаемость железа при расчете электростатического поля теоретически равняется бесконечности [29]. При проведении расчетов диэлектрическая проницаемость железа принималась на несколько порядков больше, чем в полиэтилене, например, $\varepsilon_{Rferr} = \varepsilon_{Rpol} \cdot 10^3$ или $\varepsilon_{Rferr} = \varepsilon_{Rpol} \cdot 10^4$. Эквипотенциальная поверхность и изолинии для этих случаев приведены на рисунке 2.



Рис. 2. Поверхность (a) и изолинии потенциала: $\varepsilon_{Rferr} = \varepsilon_{Rpol} \cdot 1000$ (б); $\varepsilon_{Rferr} = \varepsilon_{Rpol} \cdot 10000$ (в)

Из рисунка 2 видно, что изолинии в обоих случаях совпадают. Потенциал в железном включении постоянен, и вследствие этого напряженность электрического поля $E = \pm \text{grad} \varphi$ во включении равна 0. Таким образом, для получения «правильной» картины электрического поля диэлектрическую проницаемость железа достаточно взять на три порядка больше, чем проницаемость полиэтилена. Дальнейшее увеличение диэлектрической проницаемости на два-три порядка изменяет энергию электростатического поля в пределах 1%.

Решение уравнения Лапласа (4) с условиями (7), (8) для однородного материала без включений дает распределение потенциала в области ABCD, показанное на рисунке 3.



Рис. 3. Поверхность (а) и изолинии (б) потенциала ф в однородном материале

Напряженность поля в однородном материале определяется простой аналитической зависимостью [30]:

$$E_{y} = 2/l_{AD} = 524,9 \,\mathrm{B/M},$$

где E_y — напряженность поля по оси y. Напряженность поля также можно вычислить как производную потенциала, полученного из численного решения уравнения Лапласа (4):

$$E_y = -\frac{\partial \varphi}{\partial y} = 525 \,\mathrm{B/m}.$$

Разница между аналитическим и численным решением составляет менее 0,02%.

<u>Пример 2.</u> В однородное электростатическое поле с напряженностью 525 В/м вносится металлическое круглое включение. В результате решения уравнения Лапласа (4) с граничными условиями Дирихле и Неймана находится распределения потенциала в неоднородном материале. Поверхность и изолинии модуля напряженности электрического поля приведены на рисунке 4.



Рис. 4. Поверхность (а) и изолинии модуля напряженности электрического поля (б)

Максимальное значение напряженности 1160 В/м, найденное численно, располагается в окрестности точки O2 (Рис. 4). Максимальное значение напряженности в точке O2, полученное аналитически [28, 29], равняется 1050 В/м. Погрешность составляет 10%. Значение напряженности однородного электрического поля постоянно: 525 В/м, а в точке O1, для неоднородного поля получено численно значение 4,78 В/м. Аналитический расчет дает минимальное значение напряженности 0 В/м[28, 29]. Погрешность определения напряженности в точке O1 по отношению к напряженности в однородном материале не превышает 1%.

3. Моделирование электрического поля постоянного тока. Вычисление удельной электрической проводимости КМ

Электрическое поле постоянного тока в ячейке КМ описывается следующими уравнениями:

$$\operatorname{rot} E = 0, \quad \delta = \sigma \cdot E, \quad \operatorname{div} \delta = 0,$$
 (14)

где δ — плотность тока; σ — проводимость, *Е* — напряженность электрического поля.

Введение новой переменной $E = -grad \varphi$ и подстановка ее в (14) дает уравнение:

$$\operatorname{div}(-\sigma \cdot \operatorname{grad} \varphi) = 0, \tag{15}$$

где φ — потенциал. Для его определения в рассматриваемой области необходимо решить уравнение Лапласа (15) с граничными условиями (7), (8).

Для электрического потенциала ϕ на границе двух сред с проводимостями σ_1 , σ_2 выполняются условия сопряжения (равенства потенциала и равенства нормальных компонент плотности тока):

$$\varphi_1 = \varphi_2,$$
$$\sigma_1 \frac{\partial \varphi_1}{\partial n} = \sigma_2 \frac{\partial \varphi_2}{\partial n}.$$

Решение уравнений, описывающих электрическое поле постоянных токов, отличается от решения уравнений задачи электростатики лишь матрицей физических коэффициентов конечного элемента. Для поля постоянных токов она равна

$$\begin{bmatrix} D^{(e)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{bmatrix}.$$

Из численного решения уравнения Лапласа (15) для области ABCD получается распределение потенциала φ, напряженности *E* в каждом конечном элементе. Удельную электрическую проводимость композита можно вычислить, приравнивая интегральные характеристики структурно-неоднородного тела и эквивалентного однородного материала.

Мощность тепловых потерь в проводнике согласно закону Джоуля–Ленца [28, 29] выражается в интегральной форме:

$$P = \int_{V} \sigma E^2 dV.$$

Если решить уравнения Лапласа и найти распределение потенциала и напряженности электрического поля в каждом элементе структурно-неоднородного тела, то интеграл можно заменить суммой:

$$P = \sum_{i=1}^{n} \sigma(i) E^2(i) \Delta V(i) .$$
(16)

В однородном теле мощность тепловых потерь определяется согласно выражению:

$$P = \sigma_{eff} E^2 \cdot V , \qquad (17)$$

а напряженность, соответственно, как

$$E = \frac{\varphi_{DC} - \varphi_{AB}}{l_{AD}}.$$

Из сравнения формул (16) и (17) легко получить эффективную электрическую проводимость композита:

$$\sigma_{eff} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \sigma(i) E^{2}(i) \Delta V(i)}{E_{y}^{2} \cdot V}.$$
(18)

Нетрудно заметить, что формулы (13) и (18) похожи, хотя первая выводится из равенства энергий электростатических полей, вторая — из равенства мощностей тепловых потерь в композите и в эквивалентном однородном материале.

4. Результаты расчетов. Сравнение с экспериментальными данными

Эффективные характеристики рассчитывались для двух композиций на основе силикона, содержащих в одном случае медь, в другом — графит. При расчете расположение включений в расчетной области задавалось с помощью датчика случайных чисел и допускалось взаимное касание включений. Следует отметить, что при необходимости метод позволяет также проводить расчеты одновременно для включений разной формы и размеров.

Относительная диэлектрическая проницаемость матрицы (силикона) принималась равной 2,3 (эксперимент), относительная диэлектрическая проницаемость графита — 15. Диэлектрическая проницаемость медных включений считалась в 1000 раз большей, чем у матрицы (аналогично примеру, приведенному в подразделе 2.3).

При решении уравнения Лапласа (4) с условиями (7), (8) для композита, содержащего медь, предполагалось, что диэлектрическая проницаемость меди на три-четыре порядка больше проницаемости силикона, хотя теоретически диэлектрическая проницаемость проводника в диэлектрике бесконечна [28]. В результате решения уравнения получено распределение потенциала и напряженности электростатического поля в расчетной области (приведено на рисунке 5) для композита с медью (Рис. 5*a*) и для композита с графитом (Рис. 5*б*). Рисунки отражают расположение включений в расчетной области. По формуле (13) можно вычислить эффективную диэлектрическую проницаемость (Табл.).



Рис. 5. Поверхность электрического потенциала электростатического поля φ и эквипотенциальные линии в ячейке КМ: композит с медью (*a*); композит с графитом (*б*)

п удельной электри теской проводимости композита от объемного содержания вклютении						
	Эффективная диэлектрическая проницаемость композит – Силикон+Си					
Объемная степень наполнения, %	0	5	10	17	20	30
Численный расчет	2,30	2,56	2,94	3,48	3,65	4,93
Эксперимент	_	_	-	5,10	-	_
	Эффективная диэлектрическая проницаемость композит – Силикон+графит					
Численный расчет	2,30	2,49	2,72	_	3,17	3,77
Эксперимент	-	-	-	-	4,40	-
	Эффективная электрическая проводимость ×10 ⁻⁸ , Ом ⁻¹ м ⁻¹ композиции Силикон+Си и Силикон+графит					
Численный расчет	0,126	0,143	0,165	0,194	0,203	0,275
Эксперимент (силикон+Cu)	_	-	-	0,342	-	_
Эксперимент (силикон+графит)	_	-	-	_	0,145	_

Таблица. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости и удельной электрической проводимости композита от объемного содержания включений

При расчете удельной электрической проводимости композита граничные условия на кромках области ABCD были аналогичными задаче электростатики (7), (8). Удельная электрическая проводимость матрицы (силикон) принималась равной 0,126 · 10⁻⁸ Oм⁻¹м⁻¹, удельная электрическая проводимость включений меди в расчетах на три порядка больше, чем у матрицы.

В результате решения уравнения Лапласа (4) получено распределение потенциала и напряженности электрического поля в расчетной области. Все величины в формуле (18) известны, поэтому легко находится удельная электрическая проводимость композита. В таблице приведены значения эффективной диэлектрической проницаемости и удельной электрической проводимости композита в зависимости от объемного содержания включений, полученные численным методом.

Установленные эффективные характеристики сравнивались с экспериментальными результатами для двух композиций на основе силикона, содержащих в одном случае медь 17 об.%, в другом — графит

20 об.%. Экспериментальное определение диэлектрической проницаемости материала проводилось с использованием мостового измерителя LCR-819, для измерений использовались серебряные электроды. Образцы изготавливались круглой формы диаметром 22–25 мм, толщиной 2,2–2,4 мм по ГОСТ 6433.2-71. Диаметр измерительного электрода составлял 4,7 мм. Измерения осуществлялись при комнатной температуре на двух частотах тест-сигнала (1 кГц и 10 кГц), так как заранее было неизвестно, является композит диэлектриком или проводником. Затем находилась диэлектрическая проницаемость согласно формуле

$$\varepsilon = C \cdot d / (S \cdot \varepsilon_0),$$

где $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$, *С* — удельная емкость, *d* — диаметр образца, *S* — площадь образца под электродом. Экспериментально установленная диэлектрическая проницаемость композита с медью составила 5,1, для композита с графитом — 4,4.

Удельное электрическое сопротивление вычислялось по формуле с учетом экспериментальных данных, полученных, как описано выше, с использованием мостового измерителя:

$$\rho = RS/d ,$$

где *S* — площадь образца под электродом, *d* — толщина образца, *R* — электрическое сопротивление. Удельная электрическая проводимость составила: $\sigma = 1/\rho$.

Результаты приведены в таблице. Экспериментальное значение эффективной удельной электрической проводимости для композиции с медью больше вычисленного значения на 40% для композиции с графитом — на 25%. Экспериментальные результаты для композиций с медью значительно отличаются от численных в связи с тем, что при разнице в характеристиках фаз более чем на три порядка практически результаты расчета зависят только от электрической проводимости матрицы и относительного содержания наполнителя. Во всех рассмотренных случаях точность эксперимента составляла примерно 10%, а погрешность численных результатов, возможно, связана с плоской постановкой задачи.

5. Выводы

В результате решения плоской задачи электростатики и электропроводности для ячейки из композиционного материала получены детальные распределения характеристик электромагнитного поля. Эффективная диэлектрическая проницаемость структурно-неоднородного материала вычислялась исходя из предположения, что энергия электростатического поля структурно-неоднородного материала равна энергии однородного материала. Электрическая проводимость определялась из условия равенства мощности тепловых потерь структурно-неоднородного материала и однородного эквивалентного материала.

Предлагаемый метод применим для композитов с многофазной структурой, разной формой включений и свойствами фаз, отличающимися на несколько порядков (металл–диэлектрик или диэлектрик–металл).

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий наук (ПФИ ГАН) на 2013-2020 годы по направлению фундаментальных исследований 23 «Механика деформирования и разрушения материалов, сред, изделий, конструкций, сооружений и триботехнических систем при механических нагрузках, воздействии физических полей и химически активных сред», тема 23.1.3.

Литература

- 1. Люкшин Б.А., Панин С.В., Бочкарева С.А., Корниенко Л.А., Гришаева Н.Ю., Люкшин П.А., Матолыгина Н.Ю., *Реутов А.И.* Компьютерное моделирование и конструирование наполненных композиций. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2015. – 264 с.
- 2. Bochkareva S.A., Grishaeva N.Yu., Lyukshin P.A., Lyukshin B.A. Determination of the thermal conductivity coefficient of inhomogeneous media // AIP Conf. Proc. 2014. Vol. 1623. P. 71-74. DOI
- 3. *Люкшин П.А., Люкшин Б.А., Матолыгина Н.Ю., Панин С.В.* Определение эффективных теплофизических характеристик композиционного материала // Физ. мезомех. 2008. Т. 11, № 5. С. 103-110.
- 4. Максвелл Д.К. Избранные сочинения по теории электромагнитного поля. М.: Гостехиздат, 1952. 688 с.
- Bruggeman D.A.G. Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogener Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen // Annalen der Physik. – 1935. – Vol. 416, no. 7. – P. 636-664. DOI
- 6. Weiglhofer W.S., Lakhtakia A., Michel B. Maxwell Garnett and Bruggeman formalisms for a particulate composite with bianisotropic host medium // Microw. Opt. Techn. Let. 1997. Vol. 15, no. 4. P. 263-266. DOI
- 7. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theory. London: Taylor & Francis, 2003. 181 p.
- 8. Kirkpatrick S. Percolation and conduction // Rev. Mod. Phys. 1973. Vol. 45, no. 4. P. 574-588. DOI

- 9. Landauer R. Electrical conductivity in inhomogeneous media // AIP Conf. Proc. 1978. Vol. 40. P. 2-45. DOI
- Bernasconi J. Conduction in anisotropic disordered systems: Effective-medium theory // Phys. Rev. B. 1974. Vol. 9, no. 10. – P. 4575-4579. DOI
- 11. Stroud D. Generalized effective-medium approach to the conductivity of an inhomogeneous material // Phys. Rev. B. 1975. Vol. 12, no. 8. P. 3368-3373. DOI
- 12. Фокин А.Г. Диэлектрическая проницаемость смесей // ЖТФ. 1971. Т. 41, № 6. С. 1073-1079.
- 13. Балагуров Б.Я. О влиянии формы включений на пороги протекания двумерных моделей композитов // ЖТФ. 2012. Т. 82, № 8. С. 11-17. (URL: http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/10668). (English version DOI).
- 14. Яковлева Е.Н., Яковлев В.Б., Лавров И.В. Сравнительный анализ методов для вычисления динамических характеристик композиционных диэлектриков // Международная научно-техническая конференция «Intermatic – 2012», Материалы конференции, Москва, 3-7 декабря 2012 г. – М: МИРЭА, 2012. – Ч. 3. – С. 93-96.
- 15. Снарский А.А., Женировский М.И. Перколяционные эффекты в термоэлектрических неупорядоченных двухфазных средах (критический обзор) // Термоэлектричество. 2007. № 3. С. 65-81.
- 16. Трофимов Н.Н., Канович М.З., Карташов Э.М., Натрусов В.И., Пономаренко А.Т., Шевченко В.Г., Соколов В.И., Симонов-Емельянов И.Д. Физика композиционных материалов: в 2 томах. – М.: Мир, 2005. – Т. 1, 2. – 456 с.
- Aharoni S.M. Electrical resistivity of a composite of conducting particles in an insulating matrix // J. Appl. Phys. -1972. -Vol. 43. - P. 2463-2465. DOI
- Davidson A., Tinkham M. Phenomenological equations for the electrical conductivity of microscopically inhomogeneous materials // Phys. Rev. B. –1976. – Vol. 13, no. 8. – P. 3261-3267. DOI
- Zhang M.Q., Xu J.R., Zeng H.M., Huo Q., Zhang Z.Y, Yun F.C., Friedrich K. Fractal approach to the critical filler volume fraction of an electrically conductive polymer composite // J. Mater. Sci. – 1995. – Vol. 30, no. 17. – P. 4226-4232. DOI
- 20. Xie N., Shao W, Feng L., Lv L., Zhen L. Fractal analysis of disordered conductor–insulator composites with different conductor backbone structures near percolation threshold // J. Phys. Chem. C. 2012. Vol. 116, no. 36. P. 19517-19525. DOI
- 21. Сушко М.Я., Криськив С.К. Метод компактных групп в теории диэлектрической проницаемости гетерогенных систем // ЖТФ. 2009. Т. 79, № 3. С. 97-101. (English version DOI).
- Wang M., Pan N. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials // Mater. Sci. Rep. 2008. Vol. 63, no. 1. – P. 1-30. DOI
- 23. Tuncer E., Gubański S.M., Nettelblad B. Dielectric relaxation in dielectric mixtures: Application of the finite element method and its comparison with dielectric mixture formulas // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89, no. 12. P. 8092-8100. DOI
- 24. Feng L., Xie N., Zhong J. Carbon nanofibers and their composites: a review of synthesizing, properties and applications // Materials. 2014. Vol. 7, no. 5. P. 3919-3945. DOI
- 25. Аржников А.К., Галанин М.П., Феоктистова А.В. Математическая модель для расчета электрофизических свойств нанокомпозита с туннельной электропроводностью и ее численная реализация: Препр. / ИПМ им. М.В. Келдыша. М., 2013. № 96. 30 с. (URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-96).
- 26. Бараш Л.Ю., Халатников И.М. Эффективная проводимость двумерных замощений плоскости: сравнение аналитических и численных результатов // Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования: Сб. трудов, 1-3 октября 2014 г., Таруса, Россия / Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2014. С. 18-24.
- 27. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П., Маркевич М.Н. Моделирование диэлектрических характеристик композиционных материалов на основе метода асимптотического осреднения // Наука и образование. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013. № 1. С. 49-64. DOI
- 28. Атабеков Г.И., Купалян С.Д., Тимофеев А.Б. и др. Теоретические основы электротехники: Учеб. для студентов втузов. В 3-х частях. М.: Энергия, 1979. Ч. 2, 3. 432 с.
- 29. Нейман Л.Р., Демирчян К.С. Теоретические основы электротехники. Л.: Энергия, 1975. Т. 2. 407 с.
- 30. Яковлев В.И. Классическая электродинамика: Учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2003. 267 с.
- 31. Сегерлино Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979. 392 с.

References

- Lyukshin B.A., Panin S.V., Bochkarev S.A., Kornienko L.A., Grishaeva N.Yu., Lyukshin P.A., Matolygina N.Yu., Reutov A.I. Komp'iuternoe modelirovanie i konstruirovanie napolnennykh kompozitsii [Computer simulation and designing of filled compositions]. Novosibirsk: SB RAS, 2015. 264 p.
- 2. Bochkareva S.A., Grishaeva N.Yu., Lyukshin P.A., Lyukshin B.A. Determination of the thermal conductivity coefficient of inhomogeneous media. *AIP Conf. Proc.*, 2014, vol. 1623, pp. 71-74. DOI
- 3. Lyukshin P.A., Lyukshin B.A., Matolygina N.Yu., Panin S.V. Determination of effective thermophysical characteristics of a composite material. *Physical Mesomechanics*, 2008, vol. 11, no. 5, pp. 103-110.
- 4. Maxwell J.C. *Izbrannye sochineniya po teorii elektromagnitnogo polya* [Selected works on the theory of the electromagnetic field]. Moscow: Gostekhizdat, 1952. 688 p.
- Bruggeman D.A.G. Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogener Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen [Calculation of various physical constants of heterogeneous substances. I. Dielectric constants and conductivities of the isotropic substances]. Annalen der Physik – Annals of Physics, 1935, vol. 416, no. 7, pp. 636-664. DOI
- 6. Weiglhofer W.S., Lakhtakia A., Michel B. Maxwell Garnett and Bruggeman formalisms for a particulate composite with bianisotropic host medium. *Microw. Opt. Techn. Let.*, 1997, vol. 15, no. 4, pp. 263-266. DOI

- 7. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theory. London: Taylor & Francis, 2003. 181 p.
- 8. Kirkpatrick S. Percolation and conduction. Rev. Mod. Phys., 1973, vol. 45, no. 4, pp. 574-588. DOI
- 9. Landauer R. Electrical conductivity in inhomogeneous media. AIP Conf. Proc., 1978, vol. 40, pp. 2-45. DOI
- 10. Bernasconi J. Conduction in anisotropic disordered systems: Effective-medium theory. *Phys. Rev. B.*, 1974, vol. 9, no. 10, pp. 4575-4579. DOI
- 11. Stroud D. Generalized effective-medium approach to the conductivity of an inhomogeneous material. *Phys. Rev. B*, 1975, vol. 12, no. 8, pp. 3368-3373. DOI
- 12. Fokin A.G. Dielektricheskaya pronitsaemost' smesej [Dielectric constant for mixtures]. Zhurnal Teckhnicheskoi Fisiki Tech. Phys., 1971, vol. 41, no. 6, pp. 1073-1079.
- 13. Balagurov B.Ya. Influence of the shape of inclusions on the percolation thresholds in 2D models of composites. *Tech. Phys.*, 2012, vol. 57, no. 8, pp. 1051-1057. DOI
- 14. Yakovlev E.N., Yakovlev V.B., Lavrov I.V. International scientific-technical conference "Internatic 2012", 3-7 December 2012, Moscow, MIREA, 2012, Part 3. Pp. 93-96.
- 15. Snarskii A.A., Zhenirovskyy M.I. Percolation effects in thermoelectric disordered two-phase media (critical review). *Journal of Thermoelectricity*, 2007, no. 3, pp. 63-79.
- Trofimov N.N., Kanovich M.Z., Kartashov E.M., Natrusov V.I., Ponomarenko A.T., Shevchenko V.G., Sokolov V.I., Simonov-Emel'yanov I.D. *Physika kompozitsionnykh materialov* [Physics of composite materials]. Moscow: Mir, 2005. 456 p.
- 17. Aharoni S.M. Electrical resistivity of a composite of conducting particles in an insulating matrix. J. Appl. Phys., 1972, vol. 43, pp. 2463-2465. DOI
- Davidson A., Tinkham M. Phenomenological equations for the electrical conductivity of microscopically inhomogeneous materials. *Phys. Rev. B.*, 1976, vol. 13, no. 8, pp. 3261-3267. DOI
- 19. Zhang M.Q., Xu J.R., Zeng H.M., Huo Q., Zhang Z.Y, Yun F.C., Friedrich K. Fractal approach to the critical filler volume fraction of an electrically conductive polymer composite. *J. Mater. Sci.*, 1995, vol. 30, no. 17, pp. 4226-4232. DOI
- 20. Xie N., Shao W, Feng L., Lv L., Zhen L. Fractal analysis of disordered conductor-insulator composites with different conductor backbone structures near percolation threshold. J. Phys. Chem. C., 2012, vol. 116, no. 36, pp. 19517-19525. DOI
- 21. Sushko M.Y., Kris'kiv S.K. Compact group method in the theory of permittivity of heterogeneous systems. *Tech. Phys.*, 2009, vol. 54, no. 3, pp. 423-427. DOI
- 22. Wang M., Pan N. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials. *Mater. Sci. Rep.*, 2008, vol. 63, no. 1, pp. 1-30. DOI
- 23. Tuncer E., Gubański S.M., Nettelblad B. Dielectric relaxation in dielectric mixtures: Application of the finite element method and its comparison with dielectric mixture formulas. J. Appl. Phys., 2001, vol. 89, no. 12, pp. 8092-8100. DOI
- 24. Feng L., Xie N., Zhong J. Carbon nanofibers and their composites: a review of synthesizing, properties and applications. *Materials*, 2014, vol. 7, no. 5, pp. 3919-3945. DOI
- 25. Arzhnikov A.K., Galanin M.P., Feoktistova A.V. Matematicheskaya model' dlya rascheta elektrofizicheskikh svoistv nanokompozita s tunnel'noi elektroprovodnost'iu i ee chislennaya realizatsiya [Mathematical model for calculating the electrical properties of nanocomposite with tunnel conductivity and its numerical implementation]. Preprint No. 96, Keldysh Institute of Applied Mathematics. Moscow, 2013. 30 p. (URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-96).
- 26. Barash L.Yu., Khalatnikov I.M. Effective conductivity of the plane consisting of pieces of different conductivities: comparing analytical and numerical results. *Vychislitel'nye tekhnologii v estestvennykh naukakh* [Computer technology in natural Sciences], ed. by R.R. Nazirov, L.N. Schur. Moscow: Space Research Institute RAS, 2014. Pp. 18-24.
- 27. Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P., Markevich M.N. Modeling of dielectric properties of composite materials on the basis of asymptotic averaging. *Science and Education*, Bauman Moscow State Technical University, 2013, no. 1, pp. 49-64. DOI
- 28. Atabekov G.I., Kupalyan S.D., Timofeev A.B., et al. *Teoreticheskie osnovy elektrotekhniki* [Theoretical bases of electrical engineering], Part 2, 3. Moscow: Energiya, 1979. 432 p.
- 29. Neumann L.R., Demirchyan K.S. *Teoreticheskie osnovy elektrotekhniki* [Theoretical bases of electrical engineering]. Leningrad: Energiya, 1975, vol. 2. 407 p.
- 30. Yakovlev V.I. *Klassicheskaya elektrodinamika* [Classical electrodynamics]. Novosibirsk: Novosibirsk State University, 2003. 267 p.
- 31. Segerlind L.J. Applied finite element analysis. NY: John Wiley & Sons, 1982. 428 p.

Поступила в редакцию 01.07.2016; опубликована в электронном виде 30.03.2017

Сведения об авторах

Гришаева Наталия Юрьевна, кфмн, техник, доц., ИФПМ СО РАН; e-mail: anohina@mail2000.ru

Матолыгина Наталья Юрьевна, кфмн, нс, доц., ИФПМ СО РАН; e-mail: ksa@ispms.tsc.ru

Люкшин Петр Александрович, кфмн, снс, Институт физики прочности и материаловедения СО РАН (ИФПМ СО РАН), 634055, Томск, пр. Академический, д. 2/4; e-mail: petrljuk@ispms.tsc.ru

Люкшин Борис Александрович, проф., дтн, заф. каф., Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР); 634050, Томск, пр. Ленина, д. 40; e-mail: lba2008@yandex.ru

Панин Сергей Викторович, проф., дтн, зам. дир., ИФПМ СО РАН; e-mail: svp@ispms.tsc.ru

Бочкарева Светлана Алексеевна, кфмн, нс, доц., ИФПМ СО РАН; e-mail: svetlanab7@yandex.ru

Уцын Григорий Евгеньевич, кфмн, доц., инж., ТУСУР; e-mail: anohina@mail2000.ru