

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЫ МЕЖДУ ВКЛЮЧЕНИЕМ И МАТРИЦЕЙ ПРИ СИНТЕЗЕ КОМПОЗИТА

М.А. Анисимова

Научный руководитель: профессор, д. ф-м. н. А.Г. Князева
 Национальный исследовательский Томский политехнический университет
 E-mail: anisimova_mawa@mail.ru

В настоящее время все чаще используются композиционные материалы усиленные алмазными частицами. Они широко используются для управления температурным режимом электронных компонентов. Поскольку выходная мощность электронных устройств становится все выше, они генерируют больше тепла. Рабочая температура совместно с возникающими термическими напряжениями ограничивают надежность электронных деталей и требуют новых материалов с высокой тепловой и электрической проводимостью и низким коэффициентом теплового расширения. К таким материалам, как раз относятся композиты с металлической матрицей и алмазными включениями. Для улучшения связи между матрицей и частицами на последние предварительно наносят покрытие, которое существенно влияет на эффективные свойства композита.[1] Особый интерес представляют процессы на границе раздела фаз, определение физико-механических свойств и характеристик полученного материала. В процессе кристаллизации между матрицей и включением образуется переходный слой с новым химическим составом. Толщина данного слоя оказывает существенное влияние на свойства всего композита. [2]

В данной работе мы численно проанализировали сферически симметричную задачу о формировании переходной зоны между частицей с покрытием и матрицей. Модель учитывает диффузию и формирование фаз в переходной зоне. Цель работы состоит в изучении влияния технологических параметров процесса изготовления композита на толщину и состав этой зоны.

В работе рассмотрен композит с алюминиевой матрицей и алмазными включениями, предварительно покрытыми слоем вольфрама. Принимая во внимание экспериментальные данные о структуре и составе материала [1,3,4], мы предполагаем, что возможны следующие реакции:

- 1) $W + C \rightarrow WC$; 2) $2W + C \rightarrow W_2C$; 3) $4Al + 3C \rightarrow Al_4C_3$;
- 2) 4) $12Al + W \rightarrow Al_{12}C$; 5) $5Al + W \rightarrow Al_5C$.

В модели мы предполагаем, что сферическая алмазная частица радиусом r_1 с вольфрамовым покрытием толщиной h окружена слоем материала матрицы радиусом r_2 (рис. 1).

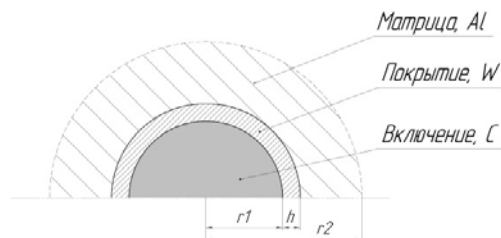


Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи

В общем случае, модель формирования переходной зоны между матрицей и включением в сферической системе координат включает в себя диффузионные уравнения для подвижных элементов (Al, W and C) и кинетические уравнения для химических соединений (WC , W_2C , Al_4C_3 , $Al_{12}C$, Al_5C):

$$\rho \frac{\partial C_k}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_k \rho \frac{\partial C_k}{\partial r} \right) + \omega_k,$$

$$\rho \frac{dC_k}{dt} = \omega_k,$$

где C_k – массовые концентрации, (массовые доли, $C_k = \rho_k / \rho$, ρ_k – парциальная плотность); t – время [с]; r – сферическая координата (радиус) [см]; D_k – эффективные коэффициенты диффузии компонентов;

$$\omega_k = \sum_{i=1}^{n_r} \nu_{ki} m_k \varphi_i$$

источники и стоки компонентов (химических элементов и соединений) [г/(см³с)]; φ_i – скорость i -ой реакции [моль/(см³с)]. ν_{ki} – стехиометрический коэффициент компонента k в реакции i , $i=1, \dots, n_r$; n_r – число реакций.

В начальный момент времени $t = 0$, имеем:

$$T = T_0,$$

для включения $0 < r < r_1$: $C_1 = 1$,

для покрытия $r_1 < r < r_1 + h$: $C_2 = 1$,

для матрицы $r_1+h < r < r_2$: $C_3=I$.

Граничные условия

$$\begin{aligned}
 & r=0, r=r_2: \frac{\partial C_1}{\partial r} = 0, \frac{\partial C_2}{\partial r} = 0, \\
 & r=r_1: \left[D_1 \frac{\partial C_1}{\partial r} \right]_{\eta-0} = \left[D_1 \frac{\partial C_1}{\partial r} \right]_{\eta+0}, \left[D_2 \frac{\partial C_2}{\partial r} \right]_{\eta-0} = \left[D_2 \frac{\partial C_2}{\partial r} \right]_{\eta+0}, \\
 & \quad [C_1]_{\eta-0} = \gamma_{12}[C_1]_{\eta+0}, [C_2]_{\eta-0} = \gamma_{11}[C_2]_{\eta+0}, \\
 & r=r_1+h: \left[D_2 \frac{\partial C_2}{\partial r} \right]_{\eta+h-0} = \left[D_2 \frac{\partial C_2}{\partial r} \right]_{\eta+h+0}, \left[D_3 \frac{\partial C_3}{\partial r} \right]_{\eta+h-0} = \left[D_3 \frac{\partial C_3}{\partial r} \right]_{\eta+h+0}, \\
 & \quad [C_1]_{\eta+h-0} = \gamma_{21}[C_1]_{\eta+h+0}, [C_2]_{\eta+h-0} = \gamma_{22}[C_2]_{\eta+h+0}.
 \end{aligned}$$

Список литературы

1. Yang B., Yu J., Chen C. Microstructure and thermal expansion of Ti coated diamond/Al composites // Trans. Nonferrous Met. Soc. China. – 2009. – Vol. 19. – P. 1167–1173.
2. Johnson W.B., Sonuparlak B. Diamond/Al metal matrix composites formed by the pressureless metal infiltration process // J. Mater. Res. – 1993. – Vol. 8, No. 5. – P. 1167–1173.
3. Liang X., Jia C., Chu C. et al. Thermal conductivity and microstructure of Al/diamond composites with Ti-coated diamond particles consolidated by spark plasma sintering // Journal of Composite Materials. – 2011. – Vol. 46, No. 9. – P. 1127–1136.
4. Yang W., Peng K., Zhu J. et al. Enhanced thermal conductivity and stability of diamond/aluminum composite by introduction of carbide interface layer // Diamond & Related Materials. – 2014. – Vol. 46 – P. 35–41.