

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ

УДК 621.762

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИТА ДЛЯ ОЦЕНКИ ЕГО УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ

М.В. Новоселова¹, Г.В. Романова²

Тверской государственный технический университет

¹*кафедра физики*

²*кафедра информатики и прикладной математики*

Дана теоретическая оценка удельного электросопротивления композиционного материала на основании компьютерного моделирования его структуры. Проведена экспериментальная проверка результатов моделирования на металлических порошковых материалах.

Введение. Одним из основных направлений современного материаловедения является получение материалов с заданными свойствами. В этом плане наиболее перспективны композиционные материалы (КМ), полученные методами порошковой металлургии. Они позволяют сохранить в композите индивидуальные свойства компонентов и получить требуемое сочетание свойств, порой антагонистических, чего невозможно достичь в традиционных сплавах. Это особенно актуально для электроконтактных материалов.

При разработке новых КМ наряду с экспериментальными все чаще используются теоретические методы. Теоретическое моделирование материала позволяет сократить количество натуральных экспериментов и повысить экономическую эффективность проектирования КМ. Аналитически можно «испытать» некоторую гипотетическую комбинацию компонентов и определить оптимальные характеристики получаемого композита. И только после этого самые перспективные подвергать лабораторным исследованиям для выработки окончательного решения по их использованию.

В статье описана теоретическая оценка удельного электросопротивления КМ на основании компьютерного моделирования его структуры.

Расчет удельного электросопротивления на модели композиционного порошкового материала. При изготовлении КМ смесь порошковых компонентов обычно проходит две основные стадии – прессование и спекание. При прессовании частицы испытывают

пластические деформации, в результате которых достигается определенная плотность материала и происходит частичное разрушение (растрескивание) поверхностных пленок на частицах. Спекание в основном предназначено для увеличения доли металлического контакта. Для оценки удельного сопротивления композиционный материал представим в виде трехмерной системы, состоящей из максимально деформированных частиц и не содержащей макропор.

Методику расчета удельного сопротивления рассмотрим на примере двухкомпонентного материала. Простейшим структурным элементом материала считаем кубическую ячейку, содержащую N^3 частиц (контактов), где N – число частиц на ребре ячейки. Суть моделирования заключается в заполнении случайным образом кубической ячейки частицами двух компонентов, концентрация которых задается их объемной долей. Для формирования координаты частицы используется ряд равномерно распределенных чисел на интервале $[0, N^3]$. При изменении объемной доли 1-го компонента β_1 от 0 до 1 удельное сопротивление ρ КМ изменяется ρ_2 до ρ_1 , где ρ_2 и ρ_1 – удельное сопротивление материала 2-го и 1-го компонента соответственно. Далее нижние индексы 1 и 2 в обозначениях также соответствуют номеру компонента.

Эквивалентное удельное сопротивление ρ композиционного материала рассчитывается двумя методами, согласно которым материал разбивается эквипотенциальными поверхностями и трубками тока [1]. В одном случае КМ рассматривается как система N последовательно соединенных слоев, содержащих N^2 параллельно соединенных контактов. Сопротивление единичного слоя рассчитывается по формуле для параллельного соединения контактов:

$$\frac{1}{(\rho_{cl})_i} = \frac{k_i}{\rho_1} + \frac{l_i}{\rho_2},$$

где k_i и l_i – число частиц 1-го и 2-го компонента в i -ом слое. Выражение для расчета сопротивления КМ имеет вид

$$\rho_{cl} = N \cdot \sum_{i=1}^N (\rho_{cl})_i. \quad (1)$$

В другом случае КМ рассматривается как система из N^2 параллельно соединенных столбцов, содержащих N последовательно соединенных контактов. Сопротивление единичного столбца рассчитывается по формуле для последовательного соединения контактов:

$$(\rho_{cm})_j = m_j \cdot \rho_1 + n_j \cdot \rho_2,$$

где m_j и n_j – число частиц 1-го и 2-го компонента в j -ом столбце. Выражение для расчета сопротивления КМ имеет вид

$$\rho_{cm} = N \left[\sum_{j=1}^{N^2} \frac{1}{(\rho_{cm})_j} \right]^{-1}. \quad (2)$$

В итоге удельное электросопротивление КМ определяется как среднее геометрическое значение удельных сопротивлений, рассчитанных по формулам (1) и (2):

$$\rho = \sqrt{\rho_{cl} \cdot \rho_{cm}}. \quad (3)$$

Результаты моделирования (3) следует считать *нижней оценкой* удельного сопротивления КМ, так как модель не учитывает наличие поверхностных (окисных) пленок на площадках контакта частиц. Из исследования процессов контактирования частиц [2] следует, что при наличии частично разрушенных поверхностных пленок удельное сопротивление ρ материала возрастает на величину $0,1 \cdot \rho / \beta$. Максимальное значение коэффициента β , учитывающего долю металлического контакта в общем контакте частиц, составляет 12 %. С учетом приведенных фактов *верхняя оценка* удельного сопротивления компактного КМ составляет $1,83 \cdot \rho$.

При изготовлении КМ смешивают навески порошков, задавая массовым соотношением компонентов. Связь между объемной β и массовой α долями компонента имеет вид

$$\beta_1 = \left[1 + \frac{d_1}{d_2} \left(\frac{1}{\alpha_1} - 1 \right) \right]^{-1} \alpha$$

где d_1 и d_2 – плотность материала 1-го и 2-го компонента.

Рассмотренная методика моделирования может быть распространена на трехкомпонентный КМ.

На рис. 1 показаны реализации расчета относительной электропроводности λ_1/λ в зависимости от объемной доли β_1 , где $\lambda_1 = 1/\rho_1$ – удельная электропроводность 1-го компонента; $\lambda = 1/\rho$ – удельная электропроводность КМ. Сопротивления компонентов отличаются в $b = \rho_2/\rho_1$ раз. Как видно из рисунка, при резко отличающихся значениях сопротивлений компонентов изменение проводимости материала происходит немонотонно и в некоторой узкой области объемной доли β_1 проводимость изменяется скачком.

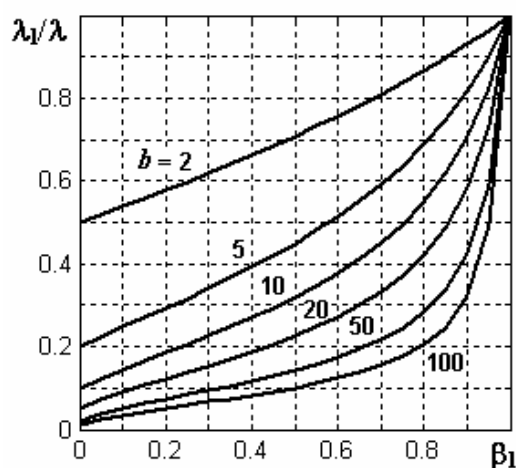


Рис. 1. Электропроводность КМ при различных соотношениях электросопротивлений компонентов

Сравнение теоретических и экспериментальных значений сопротивления. Сравнение теоретических значений удельного электросопротивления с экспериментальными [3] представлено на рис. 2 для двухкомпонентных и трехкомпонентных материалов, пористость которых не превышает 5%. Свойства компонентов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Физико-механические свойства монолитных материалов [4]

Материал	<i>Ag</i>	<i>Cu</i>	<i>W</i>	<i>Mo</i>	<i>Ni</i>
Плотность, г/см ³	10,5	8,9	19,3	10,2	8,7
Удельное сопротивление, 10 ⁻⁸ Ом·м	1,6	1,7	5,6	5,2	6,8
Твердость по Бринеллю, МПа	255	450 – 1100	1960 – 2250	1500 – 1600	981
Температура плавления, °С	962	1084	3420	2620	1455

На рис. 2 кривые 1, 2 и 3 соответствуют нижней оценке ρ (для неокисленных частиц), кривая 4 – верхней оценке (для окисленных частиц). Кривые 1 и 2 построены для материалов *AgNi* и *AgMo* соответственно. Кривые 3 и 4 – для всех указанных на рисунке КМ одновременно, так как они содержат кроме вольфрама *W* либо медь *Cu*, либо серебро *Ag*, которые обладают близкими значениями плотностей и удельных сопротивлений (см. табл. 1). Добавка третьего компонента

(никеля *Ni* в массовой доли 3 %) на электрические свойства КМ не оказывает существенного влияния.

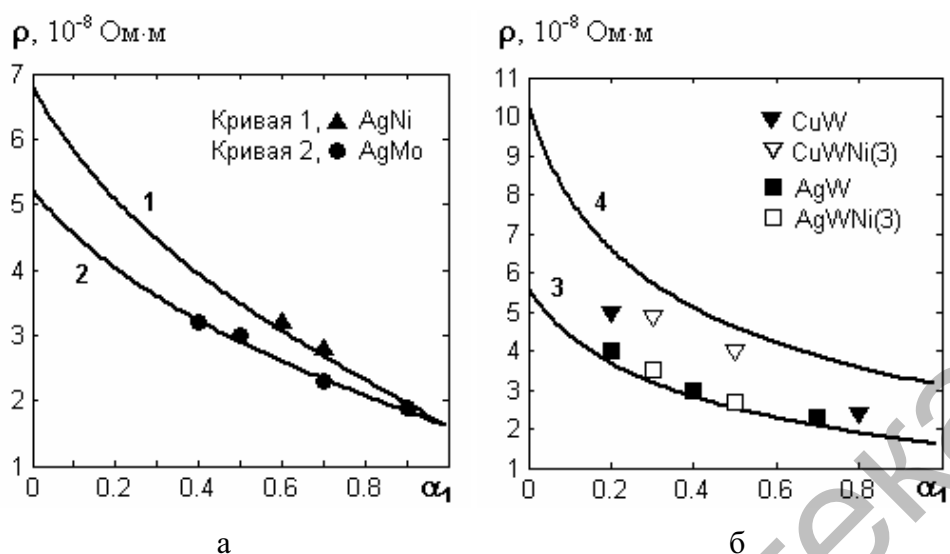


Рис. 2. Зависимость удельного сопротивления от состава материала

Для серебросодержащих образцов (*AgNi*, *AgMo*, *AgW*, *AgWNi*) наблюдается близкое расположение экспериментальных точек к теоретической кривой для материала, контакт частиц которого чисто металлический (без поверхностных пленок).

Для медьсодержащих образцов (*CuW*, *CuWNi*) экспериментальные данные лежат в диапазоне расчетных значений для окисленных и неокисленных частиц. Такое расположение можно объяснить наличием на медных частицах окисных пленок, которые, по-видимому, в процессе спекания не удалились из зоны контакта частиц.

Закключение. Сравнение экспериментальных и теоретических значений ρ показывает, что предлагаемая модель адекватно описывает электрические свойства беспористых материалов с учетом наличия поверхностных пленок на частицах. Данная модель может быть развита в направлении учета макропористости материала.

Список литературы

1. Иоссель, Ю.Я. Расчет электрической емкости / Ю.Я. Иоссель, Э.С. Кочанов, М.Г. Струнский // Л. : Энергоиздат, 1981. 288 с.
2. Измайлов, В.В. Моделирование механических и электрических процессов при консолидации дисперсных материалов / В.В. Измайлов,

- М.В. Новоселова // *Материалы. Технологии. Инструменты*. 2003. Т. 8. № 1. С. 11-16.
3. Горячева, З.В. *Спеченные материалы, их свойства и применение* / З.В. Горячева. М. : *Металлургия*, 1979. 72 с.
 4. *Физическая энциклопедия*. М.: *Научное изд-во «Большая Российская энциклопедия»*, 1988-1998. Т. 1-5.

**COMPOSITE MODELLING FOR THE ESTIMATION OF ITS
SPECIFIC ELECTRICAL RESISTIVITY**

M.V. Novosyolova, G.V. Romanova

A theoretical estimate of the specific electrical resistivity of a composite material is given on the basis of computer simulation of its structure. The results of the modelling were checked experimentally for metal powder materials.