

УДК 536.2; 539.3; 539.4; 678.073

С.В. ШИЛЬКО, канд. техн. наук, доц.
заведующий лабораторией «Механика композитов и биополимеров»¹
E-mail: shilko_mpri@mail.ru

Д.А. ЧЕРНОУС, канд. техн. наук, доц.
ведущий научный сотрудник лаборатории «Механика композитов и биополимеров»¹
доцент кафедры «Техническая физика и теоретическая механика»²
E-mail: charnavus74@gmail.com

А.И. СТОЛЯРОВ
старший преподаватель кафедры «Механика»³
E-mail: a_stol@mail.ru

Ц. ЧЖАН
профессор факультета материаловедения и техники⁴
E-mail: zhang_tsiang@hit.edu.cn

¹Институт механики металлополимерных систем имени В.А. Белого НАН Беларуси, г. Гомель, Республика Беларусь

²Белорусский государственный университет транспорта, г. Гомель, Республика Беларусь

³Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, г. Гомель, Республика Беларусь

⁴Харбинский политехнический университет, г. Харбин, Китайская Народная Республика

Поступила в редакцию 29.09.2023.

ТЕРМОМЕХАНИКА ДИСПЕРСНО-НАПОЛНЕННЫХ КОМПОЗИТОВ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН МАТЕРИАЛОВ С РЕКОРДНО ВЫСОКОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬЮ

На примере металл-алмазных композитов сформулирован и решен ряд задач термомеханики дисперсно-наполненных материалов с высокой теплопроводностью, используемых для термоуправления. В связи с важностью фактора теплопроводности межфазного слоя предложен уточненный метод расчета граничного термического сопротивления. В рамках данного способа рассматриваются два встречных тепловых потока — от матрицы к наполнителю и обратно, а также обеспечивается условие равенства нулю термического сопротивления при одинаковых значениях термомеханических характеристик указанных компонент. На основе микромеханической модели дисперсно-наполненного композита разработан аналитический метод определения эффективного коэффициента теплопроводности металл-алмазных композитов. Метод позволяет учесть граничное термическое сопротивление, наличие на алмазной частице тонкого покрытия, анизотропию алмазных частиц и пористость металлической матрицы. Результаты выполненного параметрического анализа сопоставлены с известными экспериментальными данными и оценками, полученными в рамках существующих моделей. Сделан вывод о правомерности использования разработанного метода. Разработана упрощенная конечно-элементная модель представительного объема металл-алмазных композитов в виде куба, образованного алюминиевой матрицей и содержащего 27 упорядоченно расположенных сферических алмазных частиц одинакового радиуса с модифицирующим вольфрамным покрытием. При заданной разности температур на противоположных гранях куба вычисляется распределение плотности теплового потока и эффективный коэффициент теплопроводности металл-алмазных композитов. Сопоставление результатов использования конечно-элементной модели и упомянутого выше аналитического метода свидетельствует об их хорошем соответствии. Осуществлена модификация конечно-элементной модели с целью наиболее полного соответствия реальной внутренней структуре металл-алмазных композитов, изученной при помощи рентгеновской микротомографии высокого разрешения. Выполнен численный анализ температурного поля, термонапряженного состояния и кинетики разрушения алюминиево-алмазного композита при термоциклировании.

Ключевые слова: терморегулирование, металл-алмазный композит, теплопроводность, граничное термическое сопротивление, термонапряженное состояние, кинетика разрушения, микромеханическая модель, конечно-элементный анализ

DOI: <https://doi.org/10.46864/1995-0470-2023-4-65-63-75>

Введение. Важным фактором безопасности и эффективности многих сфер жизнедеятельности стала надежность силовой электроники, средств мобильной радиосвязи, микропроцессоров, что обусловлено широким распространением и миниатюризацией электронных приборов, повышением их удельной мощности и, соответственно, тепловыделения. Этому уделяется большое внимание в электронной и аэрокосмической отраслях промышленности, а также в машиностроении (производство электромобилей и других изделий).

Применение материалов с повышенной теплопроводностью часто остается единственным способом так называемого термоуправления путем пассивного охлаждения перечисленных выше устройств. Теплопроводность обычных используемых металлов (меди, алюминия и их сплавов) уже недостаточна; к тому же они имеют довольно высокий коэффициент теплового расширения (КТР), что порождает значительные термические напряжения и коробление конструктивных элементов.

Инновационным решением считается создание металл-алмазных композитов (МАК) благодаря их высокой теплопроводности и возможности регулирования КТР [1]. Сочетание свойств металлической матрицы (хорошая теплопроводность, пластичность) и мелкодисперсного наполнителя в виде алмаза (максимальная среди известных веществ теплопроводность и твердость, а также химическая стабильность) в принципе позволяет достичь желаемого результата.

Однако из-за несовершенного контакта частиц наполнителя и металлической матрицы, обусловленного низкой смачиваемостью поверхности алмаза медью и алюминием, реальная теплопроводность и термическая прочность МАК может оказаться даже ниже, чем у названных металлов. Кроме того, существенная разница физико-механических параметров (модуля упругости, твердости, КТР) компонентов делает границу раздела компонентов слабым звеном с точки зрения усталостной прочности и стабильности коэффициента теплопроводности МАК в условиях термоциклирования.

Ранее было сделано предположение о возможности радикального снижения граничного теплового сопротивления (ГТС) с одновременным упрочнением границы раздела наполнителя (частицы алмаза) и металлической матрицы путем формирования композитного градиентного межфазного слоя модифицированием наполнителя нанопокрывтиями вольфрама, что было подтверждено экспериментально [2]. Однако в настоящее время структурная оптимизация обсуждаемых неоднородных материалов затруднена из-за отсутствия прогнозирующих моделей теплопроводности и весьма малой толщины межфазного слоя (50–100 нм) в сравнении с характерным размером алмазных частиц (50–100 мкм). В связи с этим актуально изучение механизма теплопроводности и математическое

описание процесса распространения тепла на границе раздела разнородных компонентов, а также оценки термической прочности металл-алмазных композитов в условиях циклического нагрева и охлаждения.

В данной статье описана постановка и решение соответствующих задач термомеханики, а также микромеханических моделей, использование которых позволяет выявить ряд закономерностей теплопередачи в МАК и дать рекомендации по конструированию таких материалов, одновременно обладающих высокой теплопроводностью и термической прочностью.

Аналитическое решение задач термомеханики МАК. При разработке математической модели, позволяющей прогнозировать эффективные термомеханические характеристики металл-алмазных композитов и проводить «быстрый» параметрический анализ, необходимо комплексно учесть основные особенности данных материалов, включая:

- сложную форму частиц алмазного наполнителя в виде многогранников, которая не может быть сведена к сферической;
- пористость металлической матрицы и зависимость пористости от содержания алмазного наполнителя;
- существенное влияние термического сопротивления границы раздела компонент на величину эффективного коэффициента теплопроводности композита;
- наличие на поверхности алмазной частицы тонкого модифицирующего покрытия из металлов (например, вольфрама) или карбидов металлов, наносимого для снижения граничного термосопротивления.

Расчет ГТС. Термическое сопротивление границы раздела двух материалов $R_{1 \rightarrow 2}$, называемое также сопротивлением Капицы, определяет разность температур ΔT на данной границе при течении теплового потока плотностью $q_{1 \rightarrow 2}$ от материала 1 к материалу 2:

$$q_{1 \rightarrow 2} R_{1 \rightarrow 2} = \Delta T. \quad (1)$$

Далее в качестве материала 1 выступает металлическая матрица m , материала 2 — алмазный наполнитель f . Наиболее простой и распространенный подход к определению ГТС основан на модели акустического рассогласования [3], в соответствии с которой сопротивление $R_{1 \rightarrow 2}$ вычисляется по формуле:

$$R_{1 \rightarrow 2} = \frac{2(\rho_1 v_1 + \rho_2 v_2)^2}{c_i \rho_1^2 v_1^2 \rho_2 v_2 \gamma_{1 \rightarrow 2}}, \quad \gamma_{1 \rightarrow 2} = \begin{cases} \left(\frac{v_1}{v_2}\right)^2, & v_1 < v_2; \\ 1, & v_1 \geq v_2, \end{cases} \quad (2)$$

где c_i , ρ_i , v_i — удельная теплоемкость, плотность и эквивалентная фоновая скорость для i -го материала соответственно, $i = 1, 2$.

Соотношение (2) широко используется для расчета ГТС в металл-алмазных композитах [4–7], однако не учитывает то, что в композите имеет место тепловой поток как из матрицы в направлении вклю-

чения, так и обратно; при этом расчетные значения термического сопротивления границы раздела могут существенно зависеть от направления потока.

Характеристики материала модифицирующего покрытия могут незначительно отличаться от соответствующих значений для материала матрицы. В этом случае должно выполняться требование равенства нулю теплового сопротивления при равенстве значений характеристик этих материалов. Для учета отмеченных особенностей и в связи с приближенным характером используемого варианта модели акустического рассогласования предлагается задавать эквивалентное термическое сопротивление границы раздела «матрица — наполнитель» следующим образом:

$$R_{f \leftrightarrow m} = R_{m \rightarrow f} - R_{f \rightarrow m} = \frac{2(\rho_f v_f + \rho_m v_m)^2 |c_f \rho_f v_f^3 - c_m \rho_m v_m^3|}{(\rho_f v_f \rho_m v_m)^2 c_m c_f v_{\min}^2}, \quad (3)$$

$$v_{\min} = \min(v_f, v_m).$$

Для определения сопротивления границы раздела при наличии покрытия l толщиной h используется соотношение [6, 7]

$$R = R_{f \leftrightarrow l \leftrightarrow m} = R_{f \leftrightarrow l} + \frac{h}{\lambda_l} + R_{l \leftrightarrow m}, \quad (4)$$

где λ_l — коэффициент теплопроводности материала покрытия.

Проведем сравнительный анализ расчетных оценок термического сопротивления границы раздела (более точно, межфазного слоя) для различных материалов, используемых в настоящее время в качестве компонент МАК. Экспериментальные

Таблица 1 — Теплофизические характеристики рассматриваемых материалов
Table 1 — Thermophysical characteristics of the materials under consideration

| Материал | ρ , г/см ³ | c , Дж/(кг·К) | v , км/с | λ , Вт/(м·К) |
|--|----------------------------|-----------------|------------|----------------------|
| Алмаз (C) | 3,53 | 508 | 17,51 | 1800 |
| Алюминий (Al) | 2,70 | 880 | 6,24 | 237 |
| Кремний (Si) | 2,33 | 703 | 8,97 | 126 |
| Карбид кремния (SiC) | 3,10 | 678 | 12,81 | 179 |
| Вольфрам (W) | 19,32 | 133 | 4,03 | 178 |
| Карбид вольфрама (WC) | 14,90 | 203 | 5,26 | 120 |
| Молибден (Mo) | 10,20 | 248 | 4,61 | 138 |
| Карбид димолибдена (Mo ₂ C) | 9,00 | 347 | 6,26 | 21 |
| Хром (Cr) | 7,19 | 446 | 6,98 | 90 |
| Титан (Ti) | 4,54 | 522 | 6,07 | 22 |
| Карбид титана (TiC) | 4,93 | 569 | 9,33 | 36 |
| Медь (Cu) | 8,90 | 386 | 4,91 | 398 |
| Никель (Ni) | 8,80 | 447 | 5,63 | 88 |
| Серебро (Ag) | 10,50 | 237 | 3,78 | 427 |
| Золото (Au) | 19,32 | 129 | 3,24 | 320 |

значения теплофизических характеристик компонентов при комнатной температуре, заимствованные из работ [6, 7], приведены в таблице 1.

В работах [8, 9] представлены экспериментальные данные о ГТС в контакте алмаза с различными металлами. Сопоставление результатов использования соотношений (2) и (3) с этими данными проиллюстрировано в таблице 2. Можно отметить, что соотношения (2) и (3) дают завышенные оценки граничного термического сопротивления. Наибольшее относительное отклонение расчетных значений от экспериментальных данных для формулы (2) составляет 9,2 % (соответствует Al), для формулы (3) — 6,9 % (Al).

Наиболее распространенными металлами, используемыми в качестве материала матрицы МАК, являются алюминий и медь. Остальные материалы, приведенные в таблице 1, используются, главным образом, в качестве покрытия на частицах алмаза с целью снижения граничного термического сопротивления. На рисунке 1 представлена сравнительная оценка эффективности данных покрытий при постоянной толщине $h = 0,1$ мкм. Можно отметить, что наименьшее значение эквивалентного сопротивления реализуется при использовании хромового покрытия. Однако относительно малая теплопроводность хрома не позволяет сделать однозначный вывод о преимуществе этого покрытия перед покрытиями из карбида кремния или вольфрама

Таблица 2 — Термическое сопротивление границы раздела алмаза с металлами (единица измерения [мм²·К/кВт])
Table 2 — Thermal resistance of the interface between diamond and metals (unit of measurement [mm²·K/kW])

| Металл | Расчет по формуле | | Эксперимент |
|--------|-------------------|------|-------------|
| | (2) | (3) | |
| Al | 23,7 | 23,2 | 21,7 |
| Cu | 17,7 | 17,4 | 16,7 |

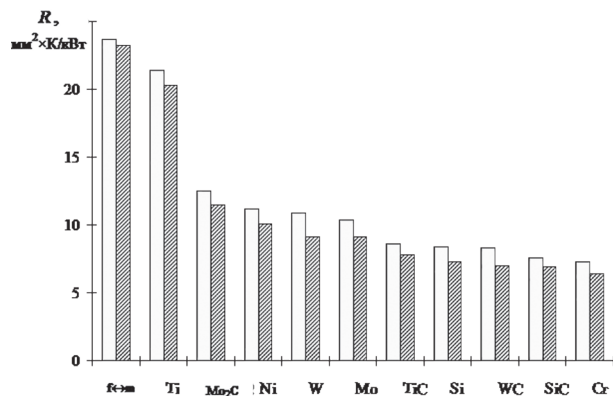


Рисунок 1 — Эквивалентное граничное термическое сопротивление МАК на алюминиевой матрице при наличии покрытия из различных материалов: $f \leftarrow m$ — отсутствие покрытия; светлые столбцы — результаты расчетов по формуле (2); заштрихованные — результаты расчетов по формуле (3)

Figure 1 — Equivalent boundary thermal resistance of metal-diamond composites (MDC) on an aluminum matrix in the presence of a coating of various materials: $f \leftarrow m$ — no coating; light columns — results of calculations using formula (2); shaded ones — according to formula (3)

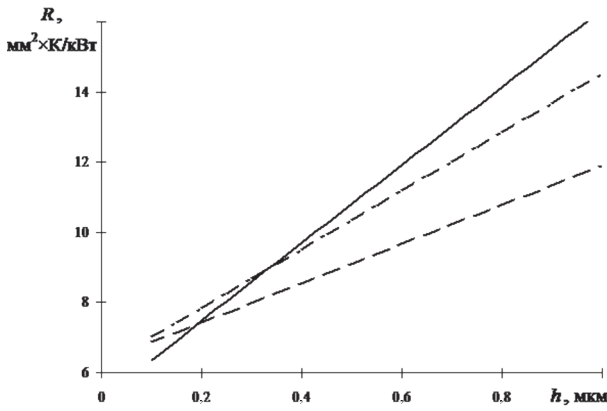


Рисунок 2 — Расчетная зависимость эквивалентного граничного термического сопротивления от толщины покрытия в МАК на алюминиевой матрице: сплошная линия — хромовое покрытие; пунктирная — покрытие из карбида кремния; штрихпунктирная — покрытие из карбида вольфрама
Figure 2 — Calculated dependence of the equivalent boundary thermal resistance on the thickness of the coating in the MDC on an aluminum matrix: solid curve — chrome coating; dashed one — silicon carbide coating; dash-dotted one — tungsten carbide coating

(рисунок 2). Зависимости на рисунке 2 построены по формулам (3) и (4).

Во всех рассмотренных вариантах расчетные оценки эквивалентного термического сопротивления, полученные по формуле (3), были на 8 ÷ 15 % меньше результатов использования формулы (2). Столь малое расхождение оценок, полученных на основе разных методик, обусловлено, во-первых, малостью сопротивления тепловому потоку «алмаз → металл» по сравнению с сопротивлением потоку «металл → алмаз», а во-вторых, малостью термического сопротивления на границе «матрица — покрытие» по сравнению с сопротивлением на границе «покрытие — алмаз».

Расчет эффективного коэффициента теплопроводности МАК. Комплексный учет большого количества факторов, влияющих на характеристики композита, возможен только в рамках упрощенных структурных моделей. В качестве таковой выберем модель Такаянаги [8]. Точность расчетных оценок при использовании этой модели ниже, чем для более сложных трехфазной модели [9] или мо-

дели Мори–Танаки [10]. Но, в отличие от трехфазной модели, модель Такаянаги позволяет относительно просто перейти к рассмотрению композита с анизометрическими частицами (рисунок 3) без использования гипотезы составного включения. При использовании данной гипотезы первоначально определяются характеристики частицы наполнителя с покрытием. Материал покрытия при этом рассматривается как матричный. Затем включение с определенными таким образом характеристиками помещают в матрицу. Такой подход, используемый в рамках модели Мори–Танаки для композита с покрытием, для тонких покрытий (толщина покрытия меньше 10 % от характерного размера частицы наполнителя) приводит к существенным погрешностям расчета. Отмеченные обстоятельства позволяют использовать модель Такаянаги для оценки эффективных термомеханических характеристик МАК на алюминиевой матрице при наличии покрытия на алмазных частицах.

В модели на рисунке 3 внутренняя призма размерами $a \times a \times b$ образована материалом наполнителя (алмаз). Слой толщиной h на частице моделирует покрытие. Остальной объем внешней призмы размерами $a_0 \times a_0 \times b_0$ образован материалом матрицы (алюминий).

В качестве исходных параметров структурной модели на рисунке 3 выступают минимальный характерный размер алмазной частицы a ; коэффициент анизотропии χ частицы, равный отношению минимального характерного размера к максимальному; толщина покрытия h ; объемная доля ϕ частиц с покрытием в композите. При известных значениях данных параметров максимальный размер частицы вычисляется по формуле $b = a/\chi$.

Минимальный размер внешней призмы является решением нелинейного уравнения

$$\frac{(a + 2h)^2 (b + 2h)}{a_0^2 (a_0 + b - a)} = \phi. \tag{5}$$

Максимальный размер внешней призмы определяется из условия равенства толщины слоя матрицы для главных осей 1, 2, 3 структурной модели

$$b_0 - b = a_0 - a \Rightarrow b_0 = a_0 + b - a = a_0 + a \left(\frac{1}{\chi} - 1 \right). \tag{6}$$

При определении эффективного коэффициента теплопроводности композита первоначально определяются соответствующие коэффициенты для теплового потока вдоль оси 1 (λ_1) и оси 3 (λ_3). Для расчета каждого из коэффициентов λ_1 и λ_3 в структурной модели выделяются три параллельно соединенных элемента. Первый (внутренний) элемент I образован последовательно соединенными частицей наполнителя, двумя слоями покрытия и двумя фрагментами матрицы. Второй элемент II (оболочка толщиной h) образован последовательно соединенными фрагментом покрытия и двумя фрагментами матрицы. Третий элемент III (оболочка

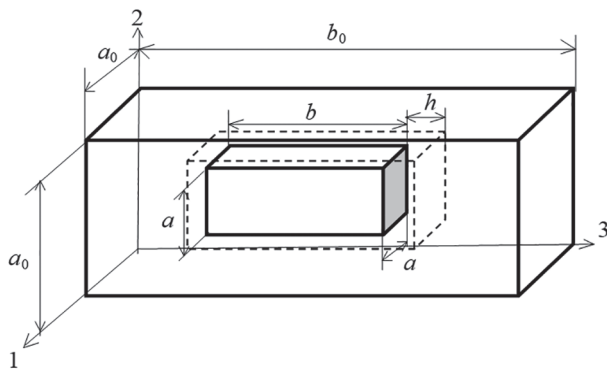


Рисунок 3 — Модель Такаянаги для композита, наполненного анизометрическими частицами с покрытием
Figure 3 — Takayanagi model for a composite filled with coated anisometric particles

толщиной $a_0/2 - a/2 - h$) образован материалом матрицы. Используя принцип суммирования теплового сопротивления для вычисления коэффициента $\lambda_1 = \lambda_2$, получим

$$\lambda_1 = \frac{ab}{a_0 b_0} \lambda_1^I + \frac{(a+2h)(b+2h) - ab}{a_0 b_0} \lambda_1^{II} + \left(1 - \frac{(a+2h)(b+2h)}{a_0 b_0}\right) \lambda_m. \quad (7)$$

Здесь для краткости записи введены обозначения:

$$\lambda_1^I = a_0 \left[\frac{a}{\lambda_f} + \frac{2h}{\lambda_l} + \frac{a_0 - a - 2h}{\lambda_m} + 2R_{f-l} + 2R_{l-m} \right]^{-1}; \quad (8)$$

$$\lambda_1^{II} = a_0 \left[\frac{a+2h}{\lambda_l} + \frac{a_0 - a - 2h}{\lambda_m} + 2R_{l-m} \right]^{-1}.$$

Аналогичные соотношения для течения теплового потока вдоль главной оси 3 имеют вид

$$\lambda_3 = \frac{1}{a_0^2} \left[a^2 \lambda_3^I + ((a+2h)^2 - a^2) \lambda_3^{II} + (a_0^2 - (a+2h)) \lambda_m \right]. \quad (9)$$

Здесь для краткости записи введены обозначения:

$$\lambda_3^I = b_0 \left[\frac{b}{\lambda_f} + \frac{2h}{\lambda_l} + \frac{b_0 - b - 2h}{\lambda_m} + 2R_{f-l} + 2R_{l-m} \right]^{-1}; \quad (10)$$

$$\lambda_3^{II} = b_0 \left[\frac{b+2h}{\lambda_l} + \frac{b_0 - b - 2h}{\lambda_m} + 2R_{l-m} \right]^{-1}.$$

В приведенных соотношениях для эффективных коэффициентов теплопроводности использованы обозначения: $\lambda_f, \lambda_l, \lambda_m$ — коэффициенты теплопроводности материалов частицы (алмаз), покрытия и матрицы соответственно; R_{f-l}, R_{l-m} — термическое сопротивление границы раздела «частица — покрытие» и «покрытие — матрица» соответственно. Термические сопротивления рассчитываются по формуле (3).

Поскольку тензор коэффициентов теплопроводности ортотропного материала является диагональным, усреднение по ориентациям главных осей в данном случае сводится к алгебраическому усреднению трех значений λ_1, λ_2 и λ_3 :

$$\lambda_c = \frac{1}{3} (2\lambda_1 + \lambda_3), \quad (11)$$

где λ_c — коэффициент теплопроводности композита с хаотично ориентированными анизотрическими частицами.

В изучаемых алмазосодержащих композитах, получаемых методом инфильтрационного прессования, частицы алмаза ориентированы хаотично. Поэтому после определения эффективных характеристик анизотропного композита по модели Такаянаги (см. рисунок 3) следует произвести усреднение по всем возможным ориентациям главных осей 1, 2 и 3.

В качестве примера использования разработанной математической модели рассмотрим МАК на алюминиевой матрице, содержащий алмазные частицы, плакированные вольфрамовым покрытием. Значения характеристик компонент МАК приведены в таблице 1. На рисунке 4 представлена расчетная зависимость коэффициента теплопроводности композита от параметра анизотрии частиц наполнителя. По мере увеличения длины наибольшего размера частицы относительно наименьшего, т. е. при уменьшении параметра анизотрии χ , коэффициент теплопроводности композита λ_c растет, что обусловлено увеличением коэффициента теплопроводности вдоль длинного ребра частицы наполнителя λ_3 .

В работах [8, 11] влияние покрытия на эффективный коэффициент теплопроводности композита учитывается в рамках модели эквивалентного сопротивления. В этом случае рассматривается двухкомпонентный композит (алмаз + матрица), но граничное термическое сопротивление вычисляется по формуле (3). Сопоставим результаты использования разработанной модели с расчетными оценками, полученными на основе гипотезы составного включения и модели эквивалентного сопротивления (рисунок 5). Для очень тонких покрытий ($h < 2$ мкм) результаты использования всех трех подходов практически совпадают. В диапазоне средних значений толщины ($5 \text{ мкм} < h < 70 \text{ мкм}$) расчетные значения коэффициента теплопроводности, полученные в рамках разработанной модели, несколько меньше в сравнении с результатами использования альтернативных методик. При $h > 70$ мкм, как и следовало ожидать, разработанная модель обеспечивает оценки, совпадающие с результатами использования гипотезы составного включения. Модель эквивалентного сопротивления приводит к существенно заниженным расчетным оценкам теплопроводности композита.

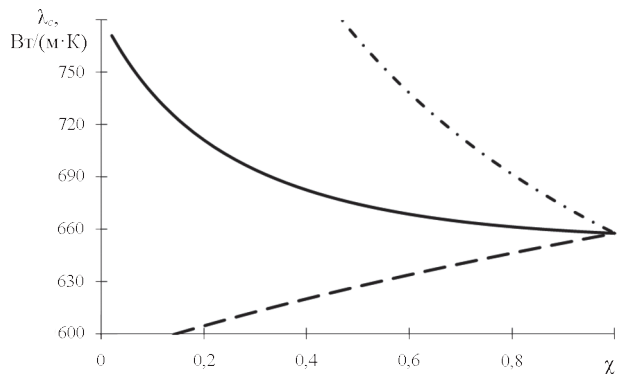


Рисунок 4 — Расчетная зависимость коэффициента теплопроводности композита от параметра анизотрии при $a = 250 \text{ мкм}$; $h = 0,1 \text{ мкм}$; $\varphi = 0,6$: λ_c — сплошная кривая; λ_1 — пунктирная; λ_3 — штрихпунктирная
 Figure 4 — Calculated dependence of the thermal conductivity coefficient of the composite on the anisotropy parameter with $a = 250 \text{ }\mu\text{m}$; $h = 0.1 \text{ }\mu\text{m}$; $\varphi = 0.6$: λ_c — solid curve; λ_1 — dashed one; λ_3 — dash-dotted one

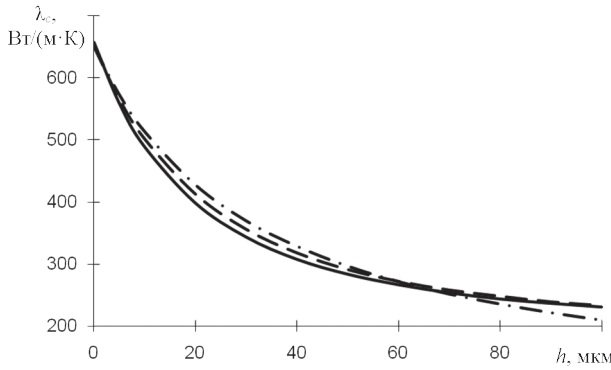


Рисунок 5 — Расчетная зависимость коэффициента теплопроводности композита от толщины покрытия при $a = 250$ мкм; $\chi = 1$; $\varphi = 0,6$: сплошная кривая — разработанная методика; пунктирная — гипотеза составного включения; штрихпунктирная — модель эквивалентного сопротивления
Figure 5 — Calculated dependence of the thermal conductivity coefficient of the composite on the coating thickness with $a = 250$ μm; $\chi = 1$; $\varphi = 0.6$: solid curve — developed technique; dashed one — composite inclusion hypothesis; dash-dotted one — equivalent resistance model

Для учета пористости матричного материала и ее роста при увеличении объемной доли алмазного наполнителя предлагается использовать гипотезу эквивалентной матрицы. В этом случае характеристики материала матрицы в выражениях (7)–(11) заменяются соответствующими характеристиками композита, в котором металлическая матрица наполнена порами. Для определения характеристик пористой матрицы используются те же соотношения (7)–(11). Наполнитель при этом имеет нулевое значение коэффициента теплопроводности. Параметр анизотропии пор принимается равным единице.

Объемная доля пор в эквивалентной матрице φ_{mp} связана с пористостью p композита в целом:

$$\varphi_{mp} = \frac{p}{1 - \varphi}, \quad (12)$$

где φ — объемная доля составных включений с учетом пористости матрицы.

Пористость композита p возрастает с увеличением доли φ . В работах [12, 13] приведены экспери-

ментальные данные о зависимости p от φ для алюминия, наполненного частицами алмаза, на которые нанесено вольфрамовое покрытие. В работе [12] показано, что данная зависимость может быть с приемлемой точностью аппроксимирована функцией:

$$p = 0,1\varphi^2(6\varphi - 1). \quad (13)$$

Для коэффициента теплопроводности пористой матрицы можно записать:

$$\lambda_{mp} = (1 - \varphi_{mp}^{2/3})\lambda_m. \quad (14)$$

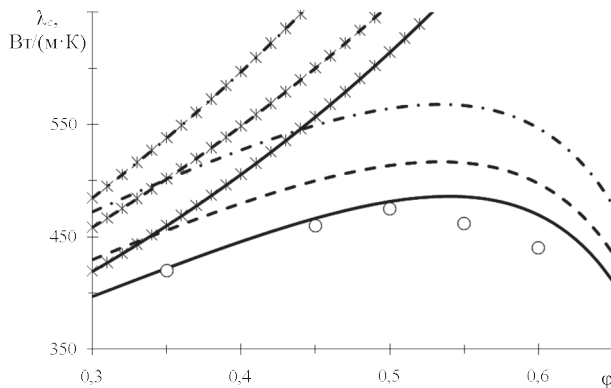
Здесь величина φ_{mp} задается соотношением (12) с учетом (13).

На рисунке 6 представлены расчетные зависимости коэффициента теплопроводности композита от объемного содержания алмазных частиц. Средний радиус частиц наполнителя $a = 100$ мкм, толщина покрытия $h = 100$ нм.

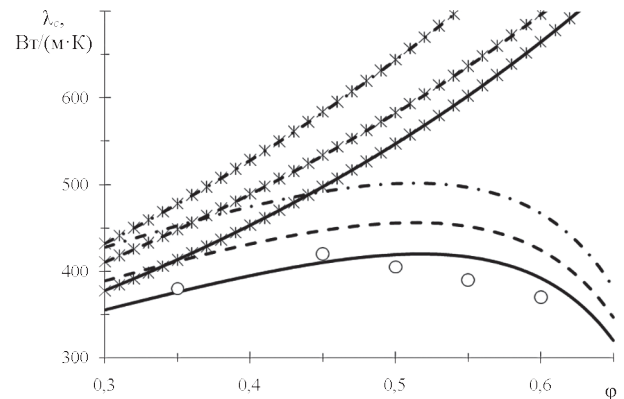
Сплошные кривые на рисунке 6 — результаты использования разработанной методики при $\chi = 1$; пунктирные — уравнения Хассельмана–Джонсона [14]; штрихпунктирные линии соответствуют модели дифференциальной эффективной среды (DEM) [15]. Маркированные кривые построены без учета пористости матрицы. Отдельными маркерами (кружками) представлены экспериментальные данные из работы [13].

Можно отметить, что предлагаемая методика обеспечивает более точные, по сравнению с альтернативными моделями, расчетные оценки коэффициента λ_c . Игнорирование увеличения с ростом содержания алмаза пористости матрицы не позволяет с приемлемой точностью прогнозировать термомеханические характеристики композита. Наличие пористости приводит к тому, что при объемной доле наполнителя свыше 0,5 (50 %) коэффициент теплопроводности композита с повышением содержания алмазных частиц уменьшается. Нанесение покрытия приводит к увеличению коэффициента λ_c .

Таким образом, разработанная расчетная методика определения эффективного коэффициента



a



b

Рисунок 6 — Зависимость коэффициента теплопроводности композита от объемного содержания наполнителя при наличии (a) и при отсутствии (b) вольфрамового покрытия на частицах алмаза

Figure 6 — Dependence of the thermal conductivity coefficient of the composite on the filler volume content in the presence (a) and absence (b) of a tungsten coating on diamond particles

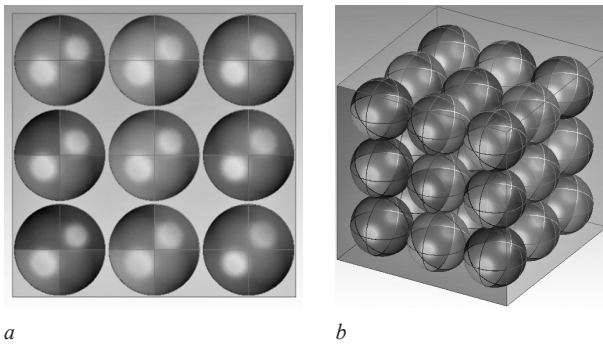


Рисунок 7 — Модельная структура металлоалмазного композита в сечении (а) и трехмерном представлении (b)
 Figure 7 — Model structure of the metal-diamond composite in cross-section (a) and three-dimensional representation (b)

теплопроводности МАК позволяет комплексно учесть его основные особенности. Однако эта методика основана на упрощенной структурной модели, что ограничивает ее использование для детального анализа напряженно-деформированного состояния изделий при термоциклировании. Для этого целесообразно привлечь численное (конечно-элементное) моделирование.

Конечно-элементное моделирование термонапряженного состояния МАК. Для численного анализа теплопередачи МАК была построена трехмерная модель представительного объема металл-алмазного композита (рисунок 7). Представительный объем являлся регулярной структурой: в матрице (куб с ребром длины 780 мкм) размещались 27 сферических частиц наполнителя диаметром 250 мкм (три ряда по девять частиц в каждом ряду). Модифицирующее покрытие задавалось на поверхности частиц алмаза в виде упругого слоя, толщина которого варьировалась от 0 до 1 мкм. На двух противоположных гранях куба задавались значения температуры, остальные грани считались теплоизолированными.

Для конечно-элементного моделирования процесса теплопередачи использовался программный продукт ANSYS версии 19.0. Параметрический анализ заключался в определении величины теплового потока и коэффициента теплопроводности с учетом термосопротивления границы раздела для различной толщины модифицирующего покрытия.

В таблице 3 выполнено сопоставление данных конечно-элементного моделирования с результатами использования формул (7)–(11), полученных в рамках модели Такаянаги, при следующих

Таблица 3 — Результаты конечно-элементного моделирования с представлением термобарьера слоем конечной толщины
 Table 3 — Results of finite element modeling with representation of the thermal barrier as a layer of finite thickness

| | | | | |
|--|-----------------------|--------|--------|--------|
| Толщина слоя, мкм | | 0,25 | 0,50 | 1,00 |
| Тепловой поток, МВт/м ² | | 12,399 | 12,462 | 12,824 |
| Коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К) | ANSYS | 313,94 | 315,53 | 324,70 |
| | Аналитическое решение | 313,44 | 312,82 | 311,57 |

значениях исходных параметров: $\varphi = 0,465$; $\chi = 1$; $a = 125$ мкм. Значения характеристик алмаза, алюминия и вольфрама приведены в таблице 1.

Можно отметить достаточно хорошее совпадение аналитических и конечно-элементных оценок эффективного коэффициента теплопроводности. Относительное отклонение численных и аналитических оценок несколько возрастает с увеличением толщины покрытия и при $h = 1$ мкм составляет 4,7 %.

При этом аналитические оценки эффективных характеристик МАК рационально дополняются их конечно-элементными моделями [16], не требующими идеализации формы структурных элементов, что позволяет реализовать комбинированные и многоуровневые численно-аналитические методы оптимизации состава материала по критерию качества изделия [17]. Наиболее полно структуру МАК характеризуют экспериментальные данные рентгеновской микротомографии (μСТ) высокого разрешения, активно применяемой в последнее время в материаловедении [18, 19].

В работе [2] при изготовлении образцов МАК для микротомографического исследования на алмазные частицы методом магнетронного напыления наносилось вольфрамовое покрытие толщиной 50 нм. С целью формирования покрытия в виде карбида вольфрама WC алмазные частицы с W-покрытием подвергались высокотемпературной обработке в вакууме (нагрев от 20 до 900 °С/мин с выдержкой в течение 60, 90 и 120 мин и последующим охлаждением вместе с печью. Изготовленные по этой технологии образцы МАК исследовались методом рентгеновской микротомографии в Шанхайском центре синхротронного излучения. На рисунке 8 представлены характерные томограммы срезов полученных образцов.

Можно заметить, что алмазные частицы, достаточно плотно упакованные в алюминиевой матрице, по своей форме близки к многогранникам (икосаэдрам и додекаэдрам). Таким образом, упрощающее предположение о форме частиц наполнителя, сделанное ранее при построении численной модели (см. рисунок 7), не вполне согласуется с данными рентгеновской микротомографии высокого разрешения (см. рисунок 8) и микроскопии МАК (рисунок 9). Отсюда следует необходимость модифицирования ранее разработанной конечно-элементной модели для более полного учета геометрических особенностей частиц алмазного наполнителя и адекватного описания теплопередачи и напряженного состояния металл-алмазных композитов.

Так как при работе электронных устройств напряженное состояние МАК определяется не только технологической предысторией, но и термоциклированием в многократно повторяемом режиме «нагрев-охлаждение», необходимо найти знак и уровень напряжений, определяющих вероятность развития первичных дефектов до значимых

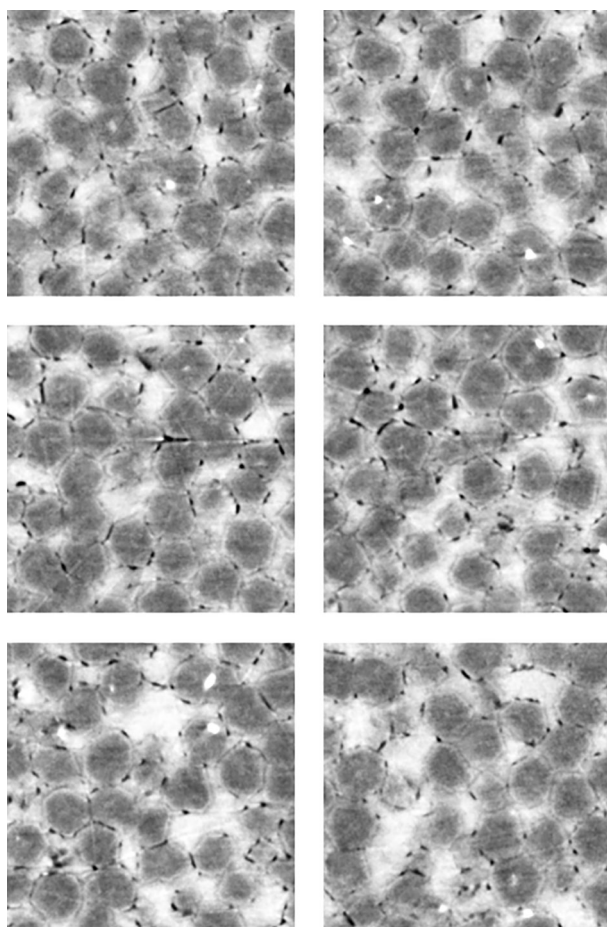


Рисунок 8 — Характерные изображения структуры композита «алмаз — алюминий» в шести сечениях, полученные методом рентгеновской компьютерной микротомографии
Figure 8 — Typical images of the “diamond — aluminum” composite structure in six sections obtained by X-ray computed microtomography

повреждений, вызывающих уменьшение теплопроводности материала. При чрезвычайно высокой разрешающей способности рентгеновской микротомографии ее возможности ограничены размерами объекта 50–70 нм, что пока не позволяет четко визуализировать структуру межфазного слоя.

Представляется, что детальное исследование напряженного состояния металл-алмазных композитов с использованием методов физической

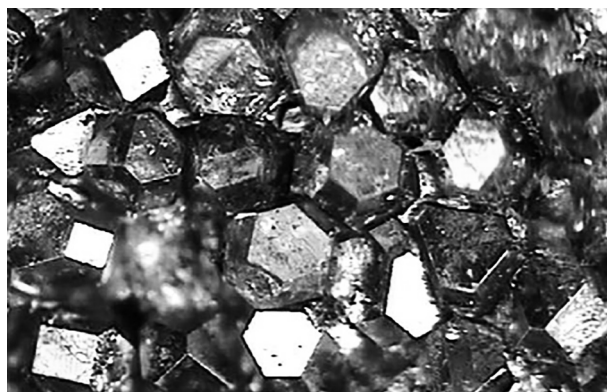


Рисунок 9 — Микроструктура композита «алмаз — алюминий»
Figure 9 — Microstructure of the “diamond — aluminum” composite

мезомеханики материалов [19] и более реалистичных конечно-элементных моделей позволит добиться одновременно высокой теплопроводности и циклической термостойкости путем оптимизации состава алмазных частиц и нанотехнологии межфазного слоя.

Как и ранее, для моделирования процесса теплопередачи и термического разрушения композита «алмаз — алюминий» нами использовался конечно-элементный программный продукт ANSYS версии 19.0. Параметрический анализ усовершенствованной конечно-элементной модели заключался в определении пространственного распределения температуры и напряженного состояния представительного объема композита с учетом термосопротивления границы раздела для различной толщины модифицирующего покрытия из карбида вольфрама.

Модель фрагмента МАК кубической формы 1×1×1 мм содержала 27 алмазных частиц в виде показанных на рисунке 10 правильных многогранников (икосаэдров) размером 250–260 мкм, имеющих по 20 треугольных граней и размещенных в три ряда по девять частиц в каждом. На частицах присутствовало тонкое модифицирующее покрытие, толщина которого в расчетах варьировалась от 0 до 1 мкм. На двух противоположных гранях куба задавались значения температуры, остальные грани считались теплоизолированными. Значения термомеханических характеристик материалов, необходимые для расчета термонапряженного состояния композита, представлены в таблице 4 (α — коэффициент термического расширения; K — объемный модуль; G — модуль сдвига). Предел прочности алюминия, как менее прочной компоненты МАК, задавался равным 60 МПа. Значения остальных необходимых для расчета характеристик приведены в таблице 1.

Результаты моделирования теплопередачи и напряженного состояния МАК представлены на рисунках 11 и 12 соответственно.

Конечно-элементная модель была использована для описания процесса теплоотвода при термоциклировании. На рисунке 13 а показан фрагмент теплоотводящей пластины, соответствующий

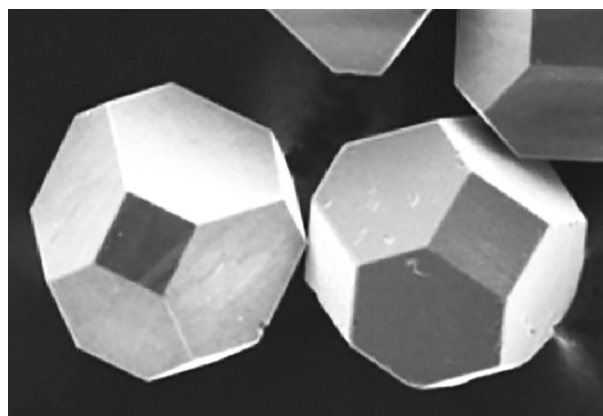


Рисунок 10 — Представление алмазных частиц многогранниками
Figure 10 — Representation of diamond particles by polyhedrons

Таблица 4 — Исходные данные для расчета термомеханических характеристик МАК
 Table 4 — Initial data for calculating the MDC thermomechanical characteristics

| Материал (компонента) | α , $10^{-6}/K$ | K , ГПа | G , ГПа |
|---------------------------|------------------------|-----------|-----------|
| Алмаз (включение) | 2,3 | 580,0 | 360 |
| Вольфрам (межфазный слой) | 4,3 | 310,0 | 161 |
| Алюминий (матрица) | 22,6 | 66,8 | 26 |

испытаниям экспериментального образца МАК на термопрочность при циклическом нагреве и охлаждении в термокамере. В этом фрагменте нижняя грань призматического представительного объема МАК соединена с алюминиевым основанием в виде квадратной пластины толщиной 1,5 мм. Геометрическая модель представительного объема МАК размером $0,57 \times 0,64 \times 1,02$ мм характеризуется достаточно плотной упаковкой частиц, при которой допускаются смещения частиц из плоскости элементарных слоев (см. рисунок 13 *b*). На рисунках 13 *b*, *c* показаны упорядоченная структура алмазных частиц в представительном объеме и взаимное расположение частиц при их более плотной упаковке соответственно.

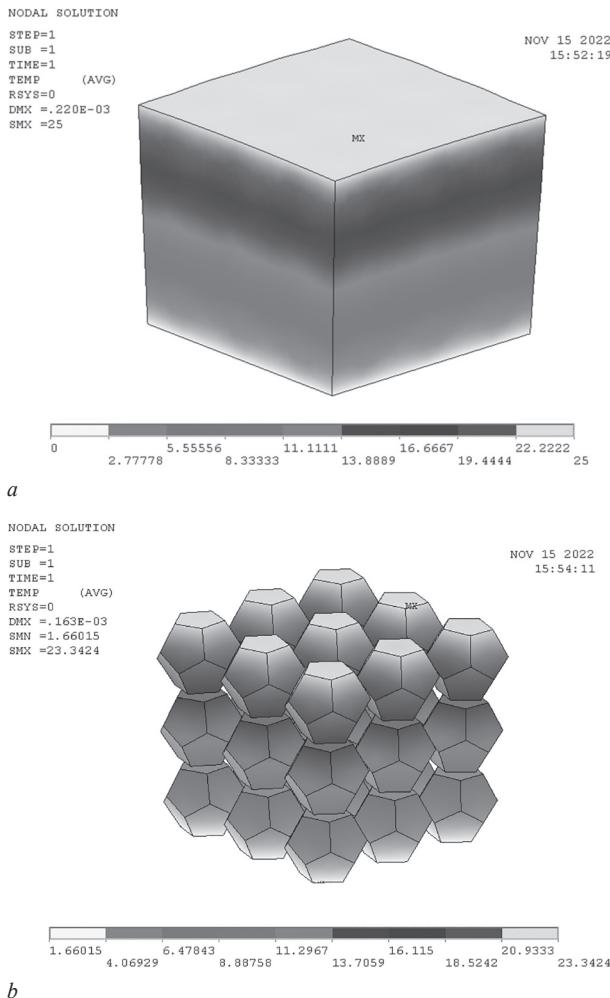


Рисунок 11 — Распределение температуры в моделируемой микрообласти (а) и частицах алмазного наполнителя (b)
 Figure 11 — Temperature distribution in the simulated microscopic region (a) and diamond filler particles (b)

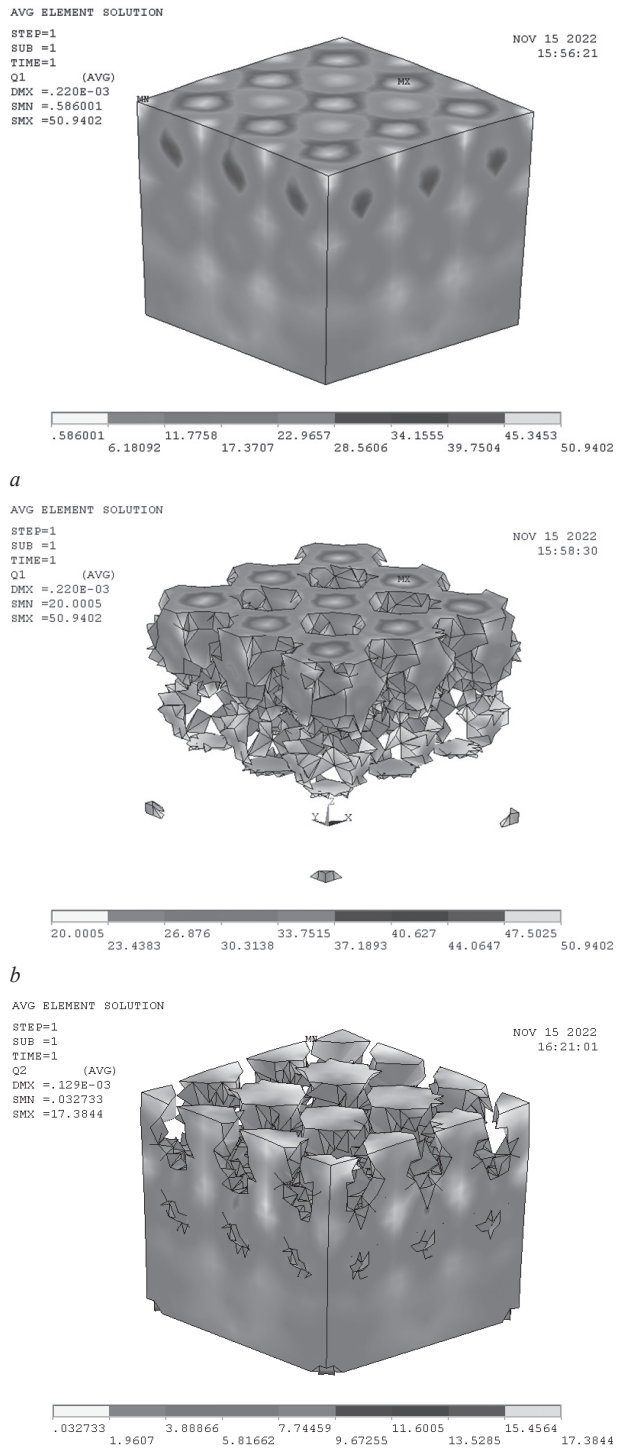


Рисунок 12 — Напряженное состояние МАК до и после возникновения повреждений алюминиевой матрицы: шаг 1 — поле эквивалентных напряжений $\sigma_{экв}$ в матрице (а) с выделением напряжений $\sigma_{экв} > 20$ МПа (b); шаг 2 — перераспределение эквивалентных напряжений $\sigma_{экв}$ в матрице после локального разрушения (c)
 Figure 12 — MDC stressed state before and after destruction of the aluminum matrix: step 1 — distribution field of equivalent stresses $\sigma_{экв}$ in the matrix (a) with highlighting stresses $\sigma_{экв} > 20$ MPa (b); step 2 — redistribution of equivalent stresses $\sigma_{экв}$ in the matrix after local destruction (c)

При моделировании фрагмента МАК было использовано 1208 алмазных частиц в виде икосаэдров, что почти в 45 раз превышает число ранее исполь-

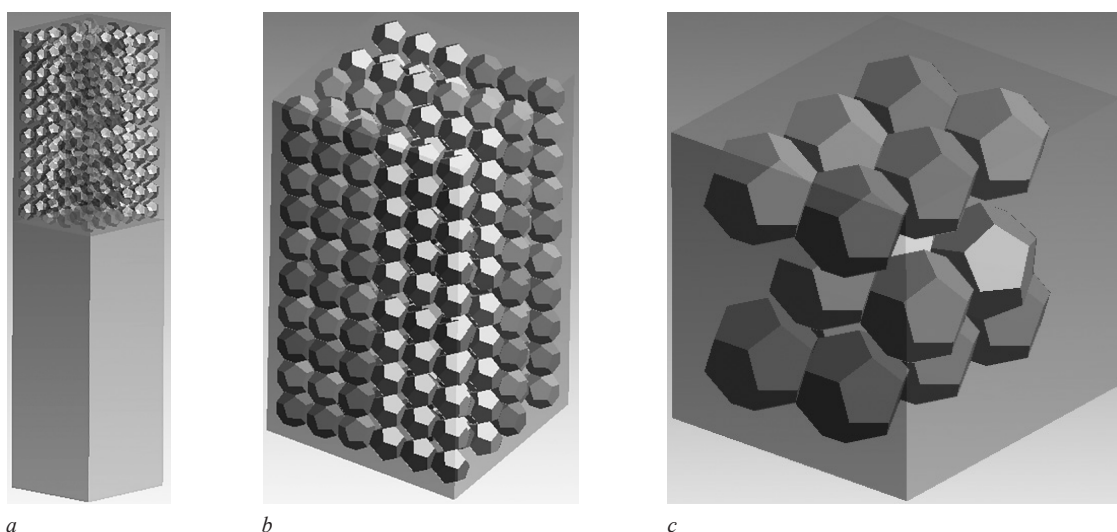


Рисунок 13 — Дискретизация задачи: фрагмент системы теплосъема (а); представительный объем композита «алмаз — алюминий» (b) и его часть, иллюстрирующая упаковку алмазных частиц (c)
Figure 13 — Task discretization: fragment of the heat removal system (a); representative volume of the “diamond — aluminum” composite (b) and its part illustrating the packing of diamond particles (c)

зованных сферических частиц. С учетом симметрии рассматривалась 1/4 часть представительного объема (302 частицы). В результате более плотной упаковки частиц в модифицированной модели достигнуто объемное содержание наполнителя 53,5 %, близкое к оптимальному по критерию максимальной теплопроводности содержанию наполнителя 60 об.%. Начальная температура $T_0 = 20^\circ\text{C}$. Число конечных элементов $\approx 100\,000$, время расчета одного термоцикла на персональном компьютере около 10 ч.

Граничные и начальные условия задачи соответствовали нагреву образца материала в термокамере в режиме, проиллюстрированном на рисунке 14.

Эволюцию микроструктуры МАК вследствие микроразрушений в матричном материале (алюминии) исследовали в температурных точках $T = 70, 80, 150, 120, 100, 60, 20, -20, -40, -65, -40, 20, 80^\circ\text{C}$. Критерием прочности являлось превышение порогового значения главного напряжения $[\sigma_1] = 60\text{ МПа}$. Поврежденность Π определяли как отношение объема «разрушенных» элементов к общему объему матрицы.

На рисунке 15 показана локализация деактивированных опцией Birth and Death элементов алюминиевой матрицы, в которых главное напряжение σ_1 превысило заданный уровень термонапряжений (50 МПа).

Представление о кинетике накопления дефектов в алюминиевой матрице дает рисунок 16.

Можно заметить, что наибольшая накопленная поврежденность (0,72 %) наблюдается при достижении 150°C . При охлаждении до 120°C поврежденность увеличилась на 0,006 % и в дальнейшем почти не изменялась до температуры -65°C , при которой были «повреждены» всего несколько элементов.

Заключение. 1. Рассмотрена проблема пассивного терморегулирования в машиностроении и электронике.

2. Для решения проблемы терморегулирования посредством металлоалмазных композитов сформулирован и решен ряд задач термомеханики, включая:

- прогнозирование термомеханических параметров МАК на основе моделей дисперсно-наполненных композитов с учетом межфазного слоя и ряда конкурирующих факторов;
- геометрически адекватное численное моделирование теплопередачи, термонапряженного состояния и кинетики разрушения МАК с использованием микротомограмм и конечно-элементной 3D-дискретизации;
- компьютерный дизайн МАК как решение обратной задачи оптимального проектирования микроструктуры по критерию максимальной теплопроводности и прочности при термоциклировании.

3. Разработан уточненный метод расчета термомеханических характеристик МАК, основанный на структурной модели Такаянаги, гипотезах составного включения и эквивалентной матрицы. Коэффициент теплопроводности определяется с учетом

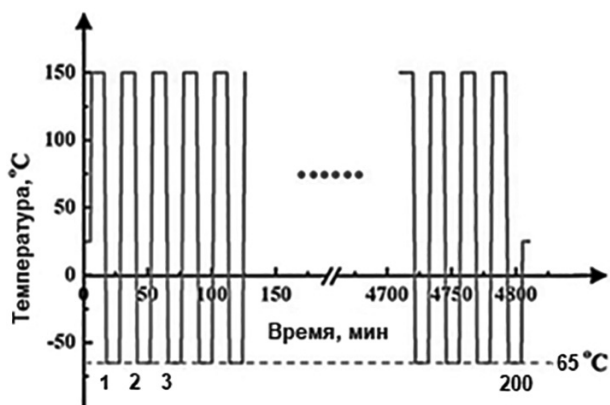


Рисунок 14 — Циклограмма термического нагружения
Figure 14 — Cyclogram of thermal loading

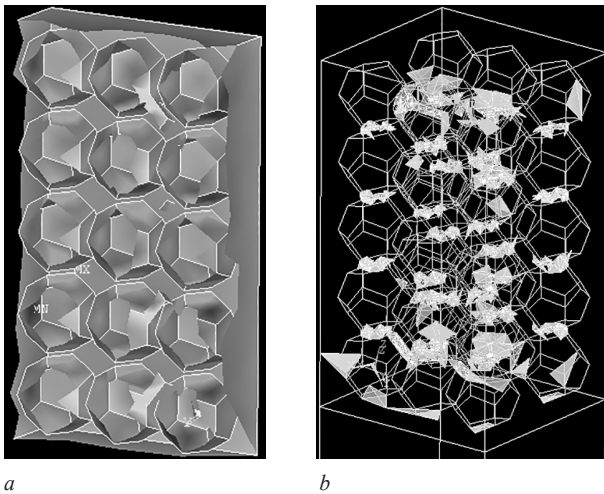


Рисунок 15 — Распределение главных напряжений σ_1 в алюминиевой матрице (a); деактивированные элементы матрицы (b)

Figure 15 — Distribution of principal stresses σ_1 in the aluminum matrix (a); deactivated matrix elements (b)

граничного термического сопротивления в контакте «наполнитель — матрица», встречных тепловых потоков и анизотропии частиц наполнителя. Сопоставление расчета с экспериментом и альтернативными теориями (уравнением Хассельмана–Джонсона и моделью дифференциальной эффективной среды) показало правомерность предложенного метода.

4. Анализ МАК «алмаз — алюминий» с W-покрытием на частицах алмаза показал:

- плакирование частиц алмаза твердыми металлами и карбидами металлов способствует снижению ГТС, однако превышение критической толщины покрытия сопровождается уменьшением теплопроводности, скорость которого значительно выше в сравнении с изменением модуля Юнга, предела прочности и КТР; в этой связи рекомендовано использовать весьма тонкие покрытия (для вольфрама — толщиной < 3 мкм);
- наблюдаемый рост пористости матрицы с повышением объемного содержания алмазных частиц препятствует достижению желаемых показателей МАК; прогнозируется объемное содержание алмазных частиц 50–60 %, превышение которого приводит к снижению коэффициента теплопроводности, модуля Юнга и предела прочности композита;
- кинетика разрушения МАК в процессе термоциклирования характеризуется быстрым накоплением начальных повреждений вблизи максимальной температуры цикла; на стадии охлаждения скорость появления новых дефектов резко уменьшается.

5. Показана перспективность компьютерного дизайна композитов с рекордно высокой теплопроводностью, сочетающего аналитические и численные решения задач термомеханики с экспериментальными данными микротомографии и диагностики свойств компонентов.

Исследование поддержано БРФФИ (T22КИ-032, T22КИТГ-003) и НФЕНК (проекты 52071117, 52111530297, 51771063).

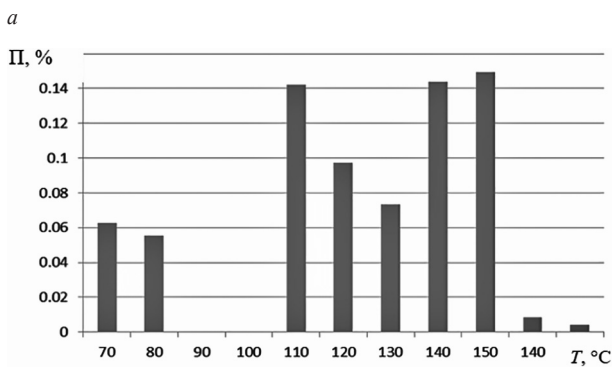
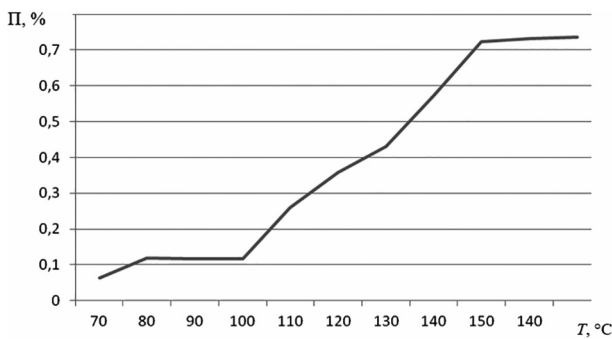


Рисунок 16 — Накопление поврежденности в алюминиевой матрице: суммирование за весь интервал (a); распределение поврежденности по температурным шагам (b)
Figure 16 — Accumulation of damage in the aluminum matrix: summation over the entire interval (a); distribution of damage over temperature steps (b)

Список литературы

1. Khan, J.A. A review on advanced carbon-based thermal interface materials for electronic devices / J. Khan, S.A. Momin, M. Mariatti // Carbon. — 2020. — Vol. 168. — Pp. 65–112. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.06.012>.
2. Effect of interface structure on thermal conductivity and stability of diamond/aluminum composites / P. Zhu [et al.] // Composites Part A. Applied science and manufacturing. — 2022. — Vol. 162. — 11 p. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2022.107161>.
3. Predicted interfacial thermal conductance and thermal conductivity of diamond/Al composites with various interfacial coatings / X. Liang [et al.] // Rare Metals. — 2011. — Vol. 30, iss. 5. — Pp. 544–549. — DOI: <https://doi.org/10.1007/s12598-011-0427-x>.
4. Prasher, R. Acoustic mismatch model for thermal contact resistance of van der Waals contacts / R. Prasher // Applied Physics Letters. — 2009. — Vol. 94, iss. 4. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3075065>.
5. Interfacial structure of carbide-coated graphite/Al composites and its effect on thermal conductivity and strength / H. Jia [et al.] // Materials. — 2021. — Vol. 14, iss. 7. — DOI: <https://doi.org/10.3390/ma14071721>.
6. Theoretical analysis of interfacial design and thermal conductivity in graphite flakes/Al composites with various interfacial coatings / Y. Liu [et al.] // Science and Engineering of Composite Materials. — 2022. — Vol. 29, iss. 1. — Pp. 500–507. — DOI: <https://doi.org/10.1515/secm-2022-0152>.
7. Enhanced thermal conductivity of diamond/aluminum composites through tuning diamond particle dispersion / Z. Tan [et al.] // Journal of Materials Science. — 2018. — Vol. 53, iss. 9. — Pp. 6602–6612. — DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-018-2024-y>.
8. Черноус, Д.А. Модифицированная модель Таканаяги деформирования дисперсно-наполненных композитов / Д.А. Черноус, С.В. Шилько // Механика композиционных материалов и конструкций. — 2012. — Т. 18, № 4. — С. 543–551.

9. Кристенсен, Р.М. Введение в механику композитов / Р.М. Кристенсен; пер. с англ. А.И. Бейля, Н.П. Жмудя. — М.: Мир, 1982. — 334 с.
10. Mori, T. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions / T. Mori, K. Tanaka // *Acta Metallurgica*. — 1973. — Vol. 21, iss. 5. — Pp. 571–574. — DOI: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3).
11. Enhanced thermal conductivity in diamond/aluminum composites with tungsten coatings on diamond particles prepared by magnetron sputtering method / W. Yang [et al.] // *Journal of Alloys and Comp.* — 2017. — Vol. 726. — Pp. 623–631. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.08.055>.
12. Anisimova, M. Effective thermal properties of an aluminum matrix composite with coated diamond inhomogeneities / M. Anisimova, A. Knyazeva, I. Sevostianov // *International Journal of Engineering Science*. — 2016. — Vol. 106. — Pp. 142–154. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2016.05.010>.
13. Microstructure and thermal properties of Al/W-coated diamond composites prepared by powder metallurgy / C. Zang [et al.] // *Materials and Design*. — 2016. — Vol. 95. — Pp. 39–47. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.01.085>.
14. Hasselman, D.P.H. Effective thermal conductivity of composites with interfacial thermal barrier resistance / D.P.H. Hasselman, L.F. Johnson // *Journal of Composite Materials*. — 1987. — Vol. 21, iss. 6. — Pp. 508–515. — DOI: <https://doi.org/10.1177/002199838702100602>.
15. Tavangar, R. Assessing predictive schemes for thermal conductivity against diamond-reinforced silver matrix composites at intermediate phase contrast / R. Tavangar, J.M. Molina, L. Weber // *Scripta Materialia*. — 2007. — Vol. 56, iss. 5. — Pp. 357–360. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2006.11.008>.
16. Дисперсно-наполненные полимерные композиты технического и медицинского назначения / Б.А. Люкшин [и др.]. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017. — 311 с.
17. Шилько, С.В. Двухуровневый метод оптимизации состава материала деталей машин из дисперсно-армированных композитов / С.В. Шилько // *Механика машин, механизмов и материалов*. — 2019. — № 2(47). — С. 51–57.
18. Thermal management applied laminar composites with SiC nanowires enhanced interface bonding strength and thermal conductivity / J. Chang [et al.] // *Nanoscale*. — 2019. — Vol. 11, iss. 34. — Pp. 15836–15845. — DOI: <https://doi.org/10.1039/C9NR04644E>.
19. Carbon nanotubes grown on graphite films as effective interface enhancement for aluminum matrix laminated composite in thermal management applications / J. Chang [et al.] // *ACS Applied Materials & Interfaces*. — 2018. — Vol. 10, iss. 44. — Pp. 38350–38358. — DOI: <https://doi.org/10.1021/acsami.8b12691>.

SHIL'KO Sergey V., Ph. D. in Eng., Assoc. Prof.

Head of the Laboratory “Mechanics of Composites and Biopolymers”¹

E-mail: shilko_mpri@mail.ru

CHERNOUS Dmitriy A., Ph. D. in Eng., Assoc. Prof.

Leading Researcher of the Laboratory “Mechanics of Composites and Biopolymers”¹

Associate Professor of the Department “Technical Physics and Theoretical Mechanics”²

E-mail: charnavus74@gmail.com

STOLYAROV Alexander I.

Senior Lecturer of the Department “Mechanics”³

E-mail: a_stol@mail.ru

ZHANG Qiang

Professor of the Faculty of Materials Science and Engineering⁴

E-mail: zhang_tsiang@hit.edu.cn

¹V.A. Belyi Metal-Polymer Research Institute of the NAS of Belarus, Gomel, Republic of Belarus

²Belarusian State University of Transport, Gomel, Republic of Belarus

³Sukhoi State Technical University of Gomel, Gomel, Republic of Belarus

⁴Harbin Institute of Technology, Harbin, People's Republic of China

Received 29 September 2023.

THERMOMECHANICS OF DISPERSE-FILLED COMPOSITES AND COMPUTER DESIGN OF MATERIALS WITH RECORD HIGH THERMAL CONDUCTIVITY

On the example of metal-diamond composites (MDC), a number of issues of thermomechanics of disperse-filled materials with high thermal conductivity used for thermal management are formulated and solved. Due to the importance of the thermal conductivity factor of the interfacial layer, a refined method is proposed for calculating the boundary thermal resistance. This method considers two counter heat flows: from the matrix to the filler and back, and also provides the condition of zero thermal resistance at the same values of the thermomechanical characteristics of these components. Based on the micromechanical model of the disperse-filled composite, an analytical method is developed for determining the effective thermal conductivity coefficient of the metal-diamond composites. The method makes it possible to take into account the boundary thermal resistance, the presence of a thin coating on the diamond particle, the anisotropy of

diamond particles and the porosity of the metal matrix. The results of the performed parametric analysis are compared with known experimental data and estimates obtained within the framework of existing models. The conclusion on the validity of the developed method is made. A simplified finite-element model is developed for a representative volume of the metal-diamond composites in the form of a cube formed by an aluminum matrix and containing 27 spherical diamond particles of the same radius with a modifying tungsten coating. At a given temperature difference on the opposite faces of the cube, the distribution of heat flux density and the effective heat transfer coefficient of the metal-diamond composites are calculated. Comparison of the results of using the finite element model and the analytical method mentioned above shows their good agreement. Modification of the finite element model is carried out in order to better match the real internal structure of the metal-diamond composites studied by high-resolution X-ray microtomography. Numerical analysis of the temperature field, thermal stress state and fracture kinetics of the aluminum-diamond composite during thermal cycling is performed.

Keywords: thermal regulation, metal-diamond composite, thermal conductivity, boundary thermal resistance, thermal stress state, fracture kinetics, micromechanical model, finite element analysis

DOI: <https://doi.org/10.46864/1995-0470-2023-4-65-63-75>

References

- Khan J., Momin S.A., Mariatti M. A review on advanced carbon-based thermal interface materials for electronic devices. *Carbon*, 2020, vol. 168, pp. 65–112. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.06.012>.
- Zhu P., Zhang Q., Qu S., Wang Z., Gou H., Shil'ko S.V., Kobayashi E., Wu G. Effect of interface structure on thermal conductivity and stability of diamond/aluminum composites. *Composites part A: Applied science and manufacturing*, 2022, vol. 162. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2022.107161>.
- Liang X., Jia C., Chu K., Chen H. Predicted interfacial thermal conductance and thermal conductivity of diamond/Al composites with various interfacial coatings. *Rare metals*, 2011, vol. 30, iss. 5, pp. 544–549. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12598-011-0427-x>.
- Prasher R. Acoustic mismatch model for thermal contact resistance of van der Waals contacts. *Applied physics letters*, 2009, vol. 94, iss. 4. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3075065>.
- Jia H., Fan J., Liu Y., Zhao Y., Nie J., Wei S. Interfacial structure of carbide-coated graphite/Al composites and its effect on thermal conductivity and strength. *Materials*, 2021, vol. 14, iss. 7. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma14071721>.
- Liu Y., Li W., Cui Y., Yang Y., Yang J. Theoretical analysis of interfacial design and thermal conductivity in graphite flakes/Al composites with various interfacial coatings. *Science and engineering of composite materials*, 2022, vol. 29, iss. 1, pp. 500–507. DOI: <https://doi.org/10.1515/secm-2022-0152>.
- Tan Z., et al. Enhanced thermal conductivity of diamond/Al composites through tuning diamond particle dispersion. *Journal of materials science*, 2018, vol. 53, iss. 9, pp. 6602–6612. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-018-2024-y>.
- Chernous D.A., Shil'ko S.V. Modifitsirovannaya model Takanayagi deformirovaniya dispersno-napolnennykh kompozitov [The modified Takanayaga model of deformation for dispersed-filled composites]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksiy*, 2012, vol. 18, no. 4, pp. 543–551 (in Russ.).
- Christensen R.M. *Mechanics of composite materials*. New York, Chichester, Brisbane, Toronto, John Wiley & Sons, 1979. 348 p.
- Mori T., Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica*, 1973, vol. 21, iss. 5, pp. 571–574. DOI: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3).
- Yang W., et al. Enhanced thermal conductivity in diamond/aluminum composites with tungsten coatings on diamond particles prepared by magnetron sputtering method. *Journal of alloys and compounds*, 2017, vol. 726, pp. 623–631. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.08.055>.
- Anisimova M., Knyazeva A., Sevostianov I. Effective thermal properties of an aluminum matrix composite with coated diamond inhomogeneities. *International journal of engineering science*, 2016, vol. 106, pp. 142–154. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2016.05.010>.
- Zhang C., Cai Z., Wang R., Peng C., Qiu K., Wang N. Microstructure and thermal properties of Al/W-coated diamond composites prepared by powder metallurgy. *Materials and design*, 2016, vol. 95, pp. 39–47. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.01.085>.
- Hasselmann D.P.H., Johnson L.F. Effective thermal conductivity of composites with interfacial thermal barrier resistance. *Journal of composite materials*, 1987, vol. 21, iss. 6, pp. 508–515. DOI: <https://doi.org/10.1177/002199838702100602>.
- Tavangar R., Molina J.M., Weber L. Assessing predictive schemes for thermal conductivity against diamond-reinforced silver matrix composites at intermediate phase contrast. *Scripta materialia*, 2007, vol. 56, iss. 5, pp. 357–360. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2006.11.008>.
- Lyukshin B.A., et al. *Dispersno-napolnennyye polimernyye kompozity tekhnicheskogo i meditsinskogo naznacheniya* [Disperse-filled polymer composites for technical and medical application]. Novosibirsk, SO RAN Publ., 2017. 311 p. (in Russ.).
- Shilko S.V. Dvukhurovnyy metod optimizatsii sostava materiala detaley mashin iz dispersno-napolnennykh kompozitov [Two-level method for optimizing material composition of machine components from disperse-reinforced composites]. *Mechanics of machines, mechanisms and materials*, 2019, no. 2(47), pp. 51–57 (in Russ.).
- Chang J., Zhang Q., Lin Y., Shao P., Pei Y., Zhong S., Wu G. Thermal management applied laminar composites with SiC nanowires enhanced interface bonding strength and thermal conductivity. *Nanoscale*, 2019, vol. 11, iss. 34, pp. 15836–15845. DOI: <https://doi.org/10.1039/C9NR04644E>.
- Chang J., Zhang Q., Lin Y., Zhou C., Yang W., Yan L., Wu G. Carbon nanotubes grown on graphite films as effective interface enhancement for an aluminum matrix laminated composite in thermal management applications. *ACS applied materials & interfaces*, 2018, vol. 10, iss. 44, pp. 38350–38358. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsami.8b12691>.