

Streszczenie

W pracy przeprowadzono symulacje komputerowe pozwalające na analizę wpływu mikrostruktury kompozytów miedź-grafen na ich przewodność cieplną. Określenie relacji pomiędzy strukturą i właściwościami badanego materiału możliwe było dzięki wykorzystaniu wieloskalowego modelu uwzględniającego cechy zarówno składowych elementów mikrostruktury (ziarna miedzi, płatki grafenu/grafitu, granice międzyfazowe) jak i ich ułożenia przestrzennego.

W pierwszym etapie pracy przeprowadzono symulacje w skali atomowej mające na celu określenie przewodnictwa cieplnego granic miedź-grafen, dla struktur różniących się zarówno ilością warstw grafenu jak i orientacją krystalograficzną ziaren miedzi. Wyniki tych obliczeń wykorzystano do parametryzacji modeli kompozytów warstwowych i dyspersyjnych. Obliczenia przewodności cieplnej kompozytów warstwowych o różnych udziałach objętościowych i grubościach płatków napełniacza wykonano przy użyciu modeli analitycznych. W pracy przeprowadzono również badania kompozytów dyspersyjnych wykorzystując metodę elementów skończonych. Rozpatrywane były dwa rodzaje struktur dyspersyjnych: izotropowa o ziarnach równoosiowych i anizotropowa o różnym stopniu wydłużenia ziaren i orientacji płatków napełniacza. Modele struktur kompozytów wzorowane były na materiałach rzeczywistych, a otrzymane wyniki poddane zostały dyskusji i weryfikacji na podstawie dostępnych wyników eksperymentalnych i innych danych zaczerpniętych z literatury.

Na podstawie otrzymanych wyników stwierdzono, że zarówno struktura kompozytu jak i morfologia grafenu wpływają na właściwości kompozytu. Dla struktur izotropowych oraz dla struktur zawierających napełniacz w postaci pojedynczych płatków grafenu stwierdzono jednoznaczny spadek przewodności cieplnej materiału wynikający m.in. z dużego udziału granic międzyfazowych o niskiej przewodności cieplnej. Polepszenie przewodności cieplnej uzyskano dla materiałów o dużej anizotropii ułożenia płatków grafenowych, na kierunku równoległym do płaszczyzny ułożenia napełniacza, co wynikało z maksymalnego wykorzystania dużej przewodności cieplnej grafenu na tym kierunku. Otrzymane wyniki mogą stanowić wskazówkę do wytwarzania materiałów o dużej przewodności cieplnej na bazie grafenu, a wykorzystana metodyka może być punktem wyjścia do symulacji przewodności cieplnej innych materiałów o podobnej strukturze.



dr hab. inż. Tomasz Wejrzanowski, prof. PW



Mateusz Grybczuk