

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Современный взгляд на проблемы теплового контактирования твёрдых тел

С.Ю. Меснянкин, А.Г. Викулов, Д.Г. Викулов

Проведён анализ основных теоретических и экспериментальных работ по контактному теплообмену за последние 40 лет. Рассмотрены теплофизические и механические процессы, связанные с распространением теплового потока через разнородные соединения твёрдых тел. Приведены аналитические и полуэмпирические зависимости, моделирующие эти процессы как в условиях вакуума, так и при наличии теплопроводящей среды в зазорах. Указаны причины экспериментально наблюдаемого эффекта выпрямления теплового потока. Отражены результаты исследований термического контакта в нестационарном режиме, а также возможности классической теории теплопроводности для описания свойств термического контакта. Приведена термодинамическая интерпретация контактного термического сопротивления и описаны основные подходы к изучению контактных явлений. Кратко рассмотрены вопросы тепловой проводимости наносистем. Указаны нерешённые теоретические проблемы и возможные методы их решения.

PACS numbers: 44.10 + i, 66.70.Df, 72.15.Eb

DOI: 10.3367/UFNr.0179.200909c.0945

Содержание

1. Введение (945).
 2. Краткий обзор теоретических и экспериментальных работ (946).
 3. Некоторые модели контактного теплообмена (947).
 4. Выпрямление теплового потока (957).
 5. Термический контакт в нестационарном режиме (959).
 6. Тепловая проводимость наносистем (961).
 7. Теплоперенос в наноплёнках (965).
 8. Заключение (968).
- Список литературы (969).

1. Введение

Анализ появившейся в последнее время литературы по тепловому контактированию твёрдых тел позволяет отметить, что данная тематика является очень актуальной. Практически на всех международных конференциях по тепломассообмену проблеме контактного теплообмена уделяется значительное внимание.

С 1970-х годов в России по вопросам теплопереноса в соединениях твёрдых тел опубликовано четыре монографии [1–4], два раздела в учебных пособиях [5, 6] и около 80 статей, в то время как за рубежом по данным реферативного журнала *Тепло- и массообмен* и обзорных статей [7–10] — более трёхсот работ.

Данные публикации можно условно разделить на следующие группы:

- работы, в которых контактная проводимость рассматривается в чисто физическом аспекте;
- экспериментальные исследования, направленные как на изучение новых типов соединений, так и на разработку различных методов определения контактного термического сопротивления;
- работы, в которых обсуждаются специальные проблемы, касающиеся геометрии контакта, циклическости нагрузок, сопутствующих явлений в зоне соединений различных материалов;

— прикладные работы по внедрению передовых разработок в различные отрасли промышленности с целью снижения непроизводительных потерь температурного напора в различных конструктивных соединениях, для термического регулирования и решения задач, связанных с созданием механически прочной теплоизоляции, имеющей большое контактное термическое сопротивление.

Контактная термическая проводимость представляет собой прежде всего поверхностный эффект, обусловленный тепловыми и механическими свойствами взаимодействующих материалов и среды в зазорах. При малой теплопроводности межконтактной среды в условиях неплотного прилегания взаимодействующих поверхностей материалов соединение является наихудшим и контактный теплообмен в основном связан с поверхностными явлениями. Если соединение осуществлено путём

С.Ю. Меснянкин, А.Г. Викулов, Д.Г. Викулов. Московский авиационный институт (государственный технический университет), Волоколамское шоссе 4, 125993, ГСП-3 Москва, Российская Федерация
Тел. (499) 158-49-81, (499) 158-43-14
Факс (499) 158-27-31
E-mail: viarticle@yandex.ru

Статья поступила 2 декабря 2008 г.,
после доработки 15 апреля 2009 г.

сварки, пайки или вакуумного напыления слоя одного материала на поверхность другого, то имеет место наилучшее соединение и контактное термическое сопротивление зависит от проводимости материалов. Все остальные варианты лежат между этими предельными случаями.

2. Краткий обзор теоретических и экспериментальных работ

За последние 30 лет теоретическим проблемам контактной термической проводимости посвящено более 100 работ. Многие из них основаны на теории, разработанной Хольмом [11] для электрических контактов и распространённой им на тепловые соединения. Рассматривается ряд вопросов, среди которых:

- термическое сопротивление единичного микроконтакта [12–15], образованного плоской поверхностью и сферой или плоской поверхностью и конусом в вакууме;
- термическое сопротивление многоточечного контакта в вакууме [16, 17];
- термическое сопротивление в контакте твёрдых тел с учётом поверхностной деформации [7, 18];
- номинально плоские шероховатые поверхности [1, 4, 7, 15];
- влияние на контактный теплообмен макрошероховатости и волнистости поверхностей [1, 4, 19, 20].

Изучается также влияние поверхностных плёнок, дефектов внедрения, химического потенциала, теплообмен в межконтактных зазорах. Рассматриваются вопросы, связанные с численным решением сопряжённой задачи контактного теплообмена в системе твёрдых тел [21].

Моделирование контакта микронеровностей взаимодействующих поверхностей в виде одиночного соединения сферических или конических выступов не принесло качественно новых решений. Получены лишь отдельные поправки для частных случаев контактного теплообмена к хорошо известным решениям Ройса и Йовановича [4].

В работе [13] рассматривается тепловая модель контактного теплообмена между шероховатыми поверхностями, учитывающая искривление линий тока при их стягивании к пятнам фактического контакта, и на её основе получено расчётное соотношение, определяющее величину контактного термического сопротивления при малых давлениях.

Широкий анализ единичных моделей приведён в работе [22], в которой обосновывается необходимость рассмотрения сферических элементов, контактирующих между собой. Аналогичный подход реализован и в трудах зарубежных учёных [14, 17], детально рассмотревших тепловые процессы в модельных элементах.

Одним из сложнейших вопросов контактного теплообмена является перенос решений единичной модели на реальные поверхности. Из литературных данных известно, что при переходе к номинально плоским поверхностям основополагающими факторами являются не только число и размер контактных пятен, но и вид деформации.

В работах, посвящённых изучению крупномасштабных неровностей поверхности, установлено, что волнистость и отклонение от плоскости ведут к возрастанию контактного термического сопротивления, а при малых нагрузках влияние волнистости является решающим [23].

В работе [24] предлагается подход, основанный на построении случайного трёхмерного распределения температур, который, учитывая обширный и постоянно развивающийся математический аппарат теории вероятностей, можно считать перспективным. Эта работа позволила выявить существенное влияние на контактные характеристики анизотропии свойств поверхностей и их взаимной ориентации.

Большая часть экспериментальных работ посвящена изучению влияния фактической площади касания, теплопроводности материалов контактной пары и среды, заполняющей зазоры, на величину термического сопротивления контакта материалов из сталей 1Х18Н9Т, 12Х18Н10Т, 45, 30, 1Х13, 30ХГСА, меди, алюминия, дюрали Д16Т, железа "Армко", молибдена, обработанных по классу шероховатости 4–10, в диапазоне температур 300–900 К при уровне механической нагрузки 0,1–20 МПа в вакууме, воздухе, среде гелия и аргона. Кроме того, в некоторых зарубежных работах были использованы материалы, не имеющие аналогов в стандартных отечественных классификациях.

В ряде новых экспериментальных работ изучается термическая проводимость в контактах перспективных материалов: слоистых, пористых, композиционных [25–28]. Описываются результаты исследований контактных переходов металл–полупроводник [29], в частности алюминий–кремний [30, 31], и полупроводник–полупроводник [32]. Приводятся значения контактного термического сопротивления для углерод–углеродистых композитов в области низких температур [33], которые показывают, что, несмотря на высокую теплопроводность таких материалов, термическое сопротивление в их контактах на два порядка больше, чем у пары медь–медь.

Для kleевых соединений металлических образцов из стали 12Х18Н10Т проведены экспериментальные исследования влияния магнитного поля на теплопроводность прослоек из полимерного клея с ферромагнитным наполнителем и влияния электрического поля на теплопроводность прослоек из полимерного клея с неферромагнитным наполнителем [34]. Установлено, что посредством приложения магнитного или электрического поля к kleевым прослойкам с дисперсными наполнителями в процессе их отверждения можно повысить теплопроводность прослоек.

В обзорных работах [1, 2, 4, 7–9] проведено обобщение обширного экспериментального материала, в том числе известных корреляционных зависимостей [8, 35, 36].

В работе [37] проведено экспериментальное исследование влияния давления на тепловые и электрические свойства контактных переходов. Акустическое исследование контактных пар Fe–Cu, Fe–Al, Fe–Ti и Cu–Al при температуре зоны соединения 310–348 К показало, что наиболее сильное изменение фактической площади контакта A_r происходит в диапазоне номинальных давлений $12 \text{ МПа} \leq P_n \leq 40 \text{ МПа}$, а при $P_n > 90 \text{ МПа}$ фактическая контактная площадь приближается к номинальной площади A_n . Данный процесс сопровождается асимптотическим стремлением к нулю производной по давлению контактного термического сопротивления $R_{th,c}$:

$$\lim_{A_r \rightarrow A_n} \frac{\partial R_{th,c}}{\partial P_n} = 0.$$

При этом сама величина $R_{th,c}$ стремится не к нулю, а к малому конечному значению $R_{th,r}$, представляющему собой термическое сопротивление фактического контакта:

$$\lim_{A_r \rightarrow A_n} R_{th,c} = R_{th,r} > 0.$$

Отсюда следует, что граница раздела твёрдых тел в зоне фактического контакта имеет конечную термическую проводимость, т.е. термическое сопротивление тесного контакта не равно нулю. Вклад сопротивления фактического контакта и связанного с ним сопротивления стягивания в полное сопротивление биметаллической системы тем больше, чем меньше сопротивления самих тел и больше номинальное давление: при $P_n = 30$ МПа — 8–18 %, при $P_n = 70$ МПа — 36–63 %, а при P_n , превышающем 90–100 МПа, — $R_{th,c} \approx R_{th,r}$.

Существование собственного термического сопротивления тесного контакта твёрдых тел авторы [37] объясняют рассеянием электронов и фононов на границе раздела непрерывных сред. Отсутствие других интерпретаций подобных результатов объясняется сложностью применения в точках разрыва температурного распределения и теплофизических свойств классической теории теплопроводности, в которой вводится понятие фиктивной термической проводимости контакта (или других похожих величин), не имеющее физического смысла и не позволяющее объяснить причины экспериментально наблюдаемых явлений.

3. Некоторые модели контактного теплообмена

Возможность термоэлектрической аналогии в контакте приводит к подобию теорий контактной термической и электрической проводимости [38, 39]. Термическое и электрическое сопротивления контакта имеют одни и те же компоненты: сопротивления стягивания к пятнам фактического контакта, сопротивления пятен фактического контакта, сопротивления оксидных плёнок, сопротивление среды в межконтактных зазорах. Различие заключается в относительных значениях тех или иных компонент в случае тепловой или электрической проводимости. Электрическое сопротивление оксидных плёнок является одной из доминирующих составляющих интегрального контактного электрического сопротивления, а аналогичная составляющая термического сопротивления обычно мала по сравнению с полным контактным термическим сопротивлением. В то же время в большинстве газовых сред и в вакууме электрическая и термическая проводимости межконтактных зазоров малы по сравнению с проводимостями пятен фактического контакта. Структура термического сопротивления реального контакта определяется по эквивалентной схеме, которая строится аналогично электрической схеме данного контакта [40].

Основная задача теории контактного теплообмена твёрдых тел заключается в определении взаимосвязи между передаваемым через соединение тепловым потоком (или его плотностью) и разностью температур на взаимодействующих поверхностях. Решение этой задачи состоит из нескольких основных этапов:

— установление геометрии системы твёрдых тел в данных термо-механических условиях;

— выяснение влияния геометрии на распределение температуры в пределах каждой непрерывной среды;

— вычисление теплофизических свойств в возмущённых слоях материалов для данного распределения температуры;

— расчёт контактного термического сопротивления, которое определяет потери температурного напора в соприкасающихся телах и равняется отношению приведённого перепада температуры на средних контактных плоскостях к плотности теплового потока:

$$R_{th,c} = \frac{1}{\alpha_{th,c}} = \frac{\Delta T}{q}, \quad (1)$$

где $\alpha_{th,c}$ — термическая проводимость контакта, $\text{Вт} \text{м}^{-2} \text{К}^{-1}$; $R_{th,c}$ — контактное термическое сопротивление, $\text{м}^2 \text{К} \text{Вт}^{-1}$; q — плотность теплового потока, $\text{Вт} \text{м}^{-2}$; ΔT — контактный перепад температуры, К. Задачи теплопроводности на границе твёрдого тела с жидкостью или газом также удобно решать, вводя термическое сопротивление контакта [15].

Наряду с $R_{th,c}$ используется абсолютное (полное) термическое сопротивление контакта $R_{th,c,a}$, определяемое отношением контактного перепада температуры ΔT к тепловому потоку Q [41]:

$$R_{th,c,a} = \frac{\Delta T}{Q}. \quad (2)$$

В отличие от контактного термического сопротивления, абсолютное термическое сопротивление $R_{th,c,a}$ соответствует не единице поверхности теплообмена, а всей поверхности, через которую передаётся тепловой поток.

Параметры шероховатости, волнистости поверхности и механические характеристики контакта одинаковы для тепловой и электрической проводимостей. При теплообмене твёрдого тела с газом или жидкостью поверхностная структура тела влияет преимущественно на конвективную составляющую. Теплопроводность интерфейса твёрдое тело – газ, твёрдое тело – жидкость, в частности, имеющая место в межконтактных зазорах при теплообмене твёрдых тел, зависит преимущественно от термодинамических и теплофизических свойств взаимодействующих систем, а также от давления газа или жидкости, в среде которых осуществляется контакт. Иначе обстоит дело для теплопроводности в контакте твёрдых тел. Поверхностные и механические свойства в интерфейсе твёрдое тело – твёрдое тело определяют фактическую площадь контакта, от которой зависит величина сопротивления стягивания. Так же как и в случае электрической проводимости, в котором данная составляющая контактного сопротивления появляется вследствие уменьшения проходного сечения для электронов от номинальной площади поперечного сечения тела до фактической площади контакта, приводящего к увеличению плотности электрического тока в областях фактического контакта (стягивание линий электрического тока к областям фактического контакта), происходит увеличение плотности теплового потока вблизи этих областей (стягивание линий теплового потока). Однако в то время как электрическое сопротивление стягивания имеет чёткую физическую интерпретацию, связанную с тем, что линии электрического тока сходятся к зонам фактического контакта, повторяя траекторию движения потока электронов, термическое сопротивление стягива-

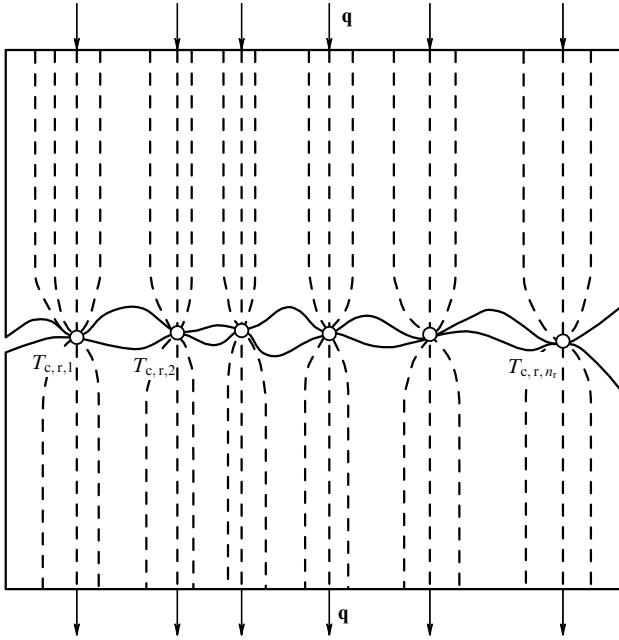


Рис. 1. Стягивание линий теплового потока к зонам фактического контакта.

ния объясняется исключительно феноменологически. В однородной среде с установившейся температурой линия теплового потока представляет собой кривую, построенную так, что имеющий постоянную величину вектор градиента температуры, направленный от одной изотермической поверхности к другой, всегда ориентирован по касательной к этой линии (рис. 1). При тепловом контакте твёрдых тел происходит искривление изотермических поверхностей. В результате линии теплового потока оказываются стянутыми к областям непосредственного соединения поверхностей [42], т.е. перенос энергии при теплопроводности осуществляется без переноса вещества, в отличие от переноса энергии при электропроводности.

Из-за наличия на твёрдых поверхностях как волнистости, так и шероховатости стягивание линий теплового потока происходит поэтапно: сначала в пределах номинальных поперечных сечений линии теплового потока стягиваются к контактным макропятнам, вызванным волнистостью, а затем в пределах каждого макропятна — к микропятнам, обусловленным шероховатостью (рис. 2) [40]. В действительности механическое взаимодействие поверхностей имеет место только в контактных микропятнах, а макропятна представляют собой области, в которых сгруппированы микропятна. С уменьшением контактного давления расстояние между пятнами фактического контакта возрастает, а микропятна становятся термически эквивалентными единичным контактам, которые моделируются как основания полубесконечных цилиндров, представляющих собой трубы теплового потока [43]. Такое приближение позволяет свести многомерную задачу теплопроводности к одномерной и упростить расчёты. Среднее арифметическое радиусов a_1, a_2, \dots, a_{n_r} определяет средний эквивалентный радиус a пятна контакта:

$$a = \frac{1}{n_r} \sum_{i=1}^{n_r} a_i,$$

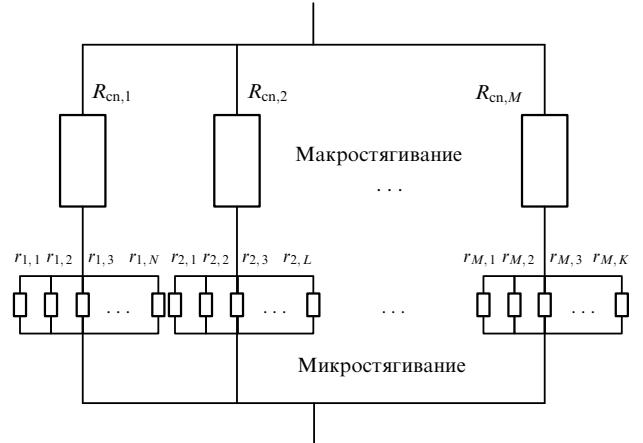


Рис. 2. Структура сопротивления стягивания.

где n_r — число пятен фактического контакта [44]. Контактное пятно с номером i имеет собственную температуру $T_{c,r,i}$. В зависимости от значений этих температур и соответствующих им радиусов a_i устанавливается такое распределение температуры в области контакта, для которого средняя контактная температура $\bar{T}_{c,r}$ будет равна [45]

$$\bar{T}_{c,r} = \frac{\sum_{i=1}^{n_r} a_i T_{c,r,i}}{\sum_{i=1}^{n_r} a_i}.$$

Таким образом, падение температуры в контакте $\bar{T}'_{w,2} - \bar{T}''_{w,2}$ может быть разложено на две части (рис. 3):

$$T'_{w,2} - T''_{w,2} = (T'_{w,2} - \bar{T}_{c,r}) + (\bar{T}_{c,r} - T''_{w,2}).$$

Если векторы тепловых потоков через пятна фактического контакта параллельны, т.е. когда задача предполагает

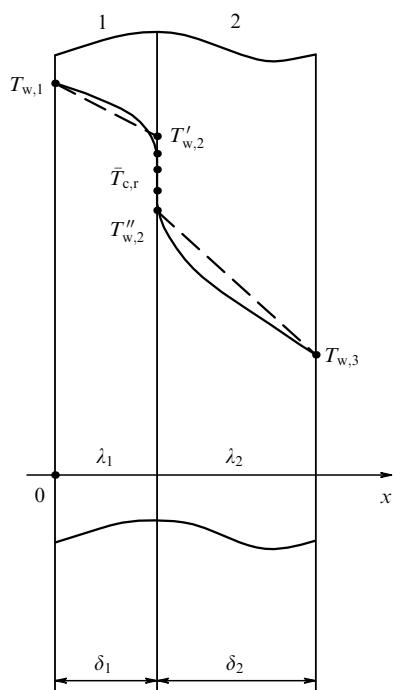


Рис. 3. Распределение температуры в контакте твёрдых тел (в теле 1 теплопроводность с возрастанием температуры увеличивается, в теле 2 — уменьшается).

гается одномерной, то слагаемые правой части последнего уравнения могут быть представлены как [45]

$$T'_{w,2} - \bar{T}_{c,r} = \frac{\delta_1 q}{\lambda_1}, \quad \bar{T}_{c,r} - T''_{w,2} = \frac{\delta_2 q}{\lambda_2},$$

где q — плотность теплового потока через плоскость контакта, Вт м^{-2} ; λ_1, λ_2 — теплопроводности взаимодействующих тел; δ_1, δ_2 — функции, характеризующие стягивание линий теплового потока к пятнам фактического контакта в материалах 1 и 2, м. Эти функции идентичны, поскольку зависят только от микрореометрии (распределения радиусов контактных зон a_1, a_2, \dots, a_n , в пределах контурной площади контакта F_a), которая одинакова для обоих материалов, и термической проводимости контактных сред. Отсюда следует соотношение

$$\frac{T'_{w,2} - \bar{T}_{c,r}}{\bar{T}_{c,r} - T''_{w,2}} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1},$$

из которого можно найти среднюю температуру контакта

$$\bar{T}_{c,r} = \frac{T'_{w,2} + (\lambda_2/\lambda_1) T''_{w,2}}{1 + \lambda_2/\lambda_1}. \quad (3)$$

От значения температуры $\bar{T}_{c,r}$ зависит, будет ли контакт упругим или пластическим, т.е. $\bar{T}_{c,r}$ определяет фактическое контактное давление P_r и, следовательно, фактическую контактную площадь A_r :

$$A_r = \frac{N}{P_r},$$

где N — сжимающая сила, Н, направлена к контактной поверхности.

Отношение фактической площади контакта к номинальной определяет сопротивление смятия, которое во многих практически значимых случаях превышает другие составляющие контактного термического сопротивления:

$$R_{th,cn} = \frac{1}{\alpha_{th,cn}} \sim \frac{A_r}{A_n}.$$

Другими компонентами контактной термической проводимости $\alpha_{th,c}$ являются:

— проводимость среды в межконтактных зазорах $\alpha_{th,m}$;

— проводимость поверхностных пленок $\alpha_{th,f}$;

— проводимость при передаче теплового потока излучением $\alpha_{th,rad}$ [6];

— проводимость при переносе теплового потока в процессе эмиссии и туннелирования электронов через зону контакта $\alpha_{th,em}, \alpha_{th,tun}$ [38, 46].

Проводимость фактического контакта $\alpha_{th,r}$ необходимо рассмотреть отдельно по следующей причине. Фактический контакт представляет собой тесное соединение поверхностей твёрдых тел, которое близко к идеальному, поэтому термическое сопротивление $R_{th,r}$ непосредственно фактического контакта очень мало, а температура при переходе через контактные пятна считается непрерывной. Однако связанное с площадью контактных пятен сопротивление смятия $R_{th,cn}$ имеет значительную величину. Очень часто сопротивле-

ние фактического контакта ассоциируется именно с сопротивлением смятия, которое действительно имеет прямое отношение к области фактического контакта.

Построение эквивалентной схемы является одним из наиболее точных методов вычисления контактного термического сопротивления (или соответствующей проводимости). Поскольку площади, через которые проходят тепловые потоки, соответствующие тем или иным компонентам полного сопротивления, различны (например, активная площадь туннельной $R_{th,tun}$ и эмиссионной $R_{th,em}$ составляющих равна номинальной A_n , а активная площадь сопротивления смятия $R_{th,cn}$ — фактической A_r), в общем виде эквивалентная схема применима не к удельным (1), а к абсолютным (2) термическим сопротивлениям, которые представляют собой отношение удельных величин к соответствующим активным площадям:

$$R_{th,c,a} = \frac{R_{th,f,1} + R_{th,f,2}}{A_n} + \\ + \left[A_n \left(\frac{1}{R_{th,tun}} + \frac{1}{R_{th,em}} \right) + \right. \\ \left. + (A_n - A_r) \left(\frac{1}{R_{th,m}} + \frac{1}{R_{th,rad}} \right) + \frac{A_r}{R_{th,cn,1} + R_{th,cn,2}} \right]^{-1},$$

где $R_{th,tun}$ — термическое сопротивление при туннелировании электронов, $R_{th,em}$ — сопротивление при эмиссии электронов, $R_{th,rad}$ — сопротивление при лучистом теплообмене в контакте, $R_{th,m}$ — сопротивление среды в межконтактных зазорах, $R_{th,cn,1}, R_{th,cn,2}$ — сопротивления смятия в первом и втором материалах, $R_{th,f,1}, R_{th,f,2}$ — сопротивления пленок на взаимодействующих поверхностях первого и второго материалов, $\text{м}^2 \text{К Вт}^{-1}$. Тем не менее, если активные площади отдельных составляющих равны друг другу (например, сопротивления смятия $R_{th,cn}$ и фактического контакта $R_{th,r}$), то эквивалентная схема может строиться и для их удельных величин.

Такой подход требует детального рассмотрения и разработки методики определения каждой компоненты. При этом в зависимости от условий задачи возможны следующие допущения:

— вследствие малой толщины пленок их термические сопротивления близки к нулю, $R_{th,f} \rightarrow 0$ [47];

— при средней контактной температуре $\bar{T}_{c,r}$, не превышающей 700–1000 К, поток тепла, передающийся излучением, не превышает 2–3 % от общего теплового потока, и при умеренных температурах лучистым теплообменом в первом приближении можно пренебречь, т.е. $\alpha_{th,rad} \rightarrow 0$ [6, 48, 49];

— если средняя контактная температура $\bar{T}_{c,r}$ не превосходит примерно 2000 К, а толщина пленки δ_f превышает 1 нм, то энергии, передаваемые через контактный интерфейс в результате эмиссии и туннелирования электронов, малы по сравнению с фоновым переносом тепла и $\alpha_{th,em} \rightarrow 0, \alpha_{th,tun} \rightarrow 0$ [46, 50];

— термическое сопротивление фактического контакта, включаемое последовательно на каждой границе двух сред, близко к идеальному: $R_{th,r} \rightarrow 0 = R_{th,i}$, поэтому оно исключается из эквивалентной схемы как последовательная компонента, имеющая малую величину.

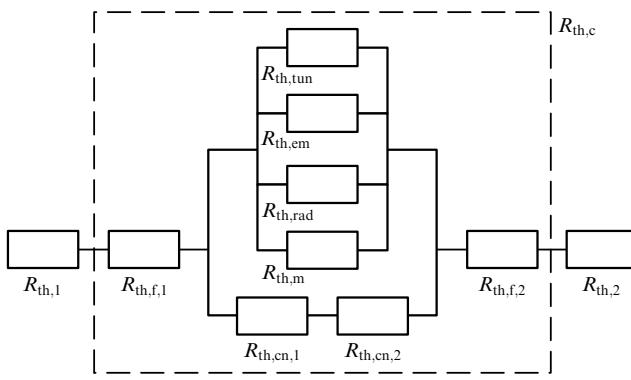


Рис. 4. Структура термического сопротивления контакта.

Таким образом, термическое сопротивление реального контакта $R_{th,c,a}$ может быть выражено через термические сопротивления стягивания $R_{th,cn,1}, R_{th,cn,2}$ в первом и втором материале и термическое сопротивление среды в межконтактных зазорах $R_{th,m}$ (рис. 4):

$$R_{th,c,a} = \frac{1}{(A_n - A_r)/R_{th,m} + A_r/(R_{th,cn,1} + R_{th,cn,2})},$$

где полное сопротивление стягивания $R_{th,cn}$ равно сумме сопротивлений стягивания в первом и втором материалах,

$$R_{th,cn} = R_{th,cn,1} + R_{th,cn,2}.$$

Если в межконтактных зазорах находится вакуум, то сопротивление среды бесконечно велико и термическая проводимость $\alpha_{th,m}$ через зазоры, представленная первым слагаемым в знаменателе, равна нулю. В этом случае термическое сопротивление реального контакта полностью определяется сопротивлением стягивания:

$$R_{th,c} = R_{th,cn}.$$

Такая ситуация широко распространена в космической технике, функционирующей в условиях вакуума, где нарастание поверхностных плёнок, которые могли бы заметно повлиять на контактную проводимость, происходит медленно. Поэтому исследования контактного теплообмена в этой области направлены, в первую очередь, на изучение механизмов образования сопротивлений стягивания и разработку методов расчёта этих сопротивлений.

Теоретические работы, посвящённые контакту разнородных металлов, делятся на четыре основные подгруппы [51]:

— "электрические", использующие электрическую теорию твёрдого тела для описания термической проводимости между металлическими поверхностями;

— "микроскопические", исследующие зависимость термического контактного сопротивления от шероховатости поверхностей;

— "макроскопические", основанные на граничном эффекте при взаимодействии макроскопических контактных площадей;

— "плёночные", принимающие во внимание влияние поверхностных плёнок на термическую проводимость контакта.

Кроме того, существуют комбинированные методы расчёта, включающие в себя две или более из указанных подгрупп. Как правило, комбинированные методы строятся на базовых параметрах, каждый из которых оказывает определённое влияние на контактный теплообмен [51]. При таких расчётах учитываются

- параметры волнистости поверхности;
- параметры шероховатости поверхности;
- средние углы микронеровностей на контактирующих поверхностях;
- число, размер и форма микронеровностей;
- контактное давление;
- история нагрузки материалов в каждой экспериментальной серии, включая деформацию материалов;
- температуры поверхностей в контакте;
- механические и теплофизические свойства материалов;
- направление и величина теплового потока;
- история термической нагрузки в каждой экспериментальной серии, в особенности количество изменений направления теплового потока.

Одной из наиболее известных аналитических моделей является следующее представление сопротивления стягивания [52]:

$$R_{th,cn,a} = \frac{\psi}{2\pi n_r \lambda a} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right), \quad (4)$$

где $R_{th,cn,a}$ — абсолютное термическое сопротивление стягивания, К Вт⁻¹; r — средний фиктивный радиус области стягивания, м; ψ — коэффициент формы контактных пятен, равный 1 для круглых пятен. С учётом того, что активной площадью сопротивления стягивания является фактическая площадь A_r , для удельного термического сопротивления контакта имеем

$$R_{th,cn} = \frac{A_r}{2\pi n_r \lambda a} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) = \frac{a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right). \quad (5)$$

Величины a, r находятся следующим образом:

— при расчёте термического сопротивления микростягивания, возникающего в результате стягивания линий теплового потока, соответствующих одному пятну, от радиуса r к радиусу a :

$$a = \sqrt{\frac{A_r}{\pi n_r}}, \quad r = \sqrt{\frac{A_n}{\pi n_r}}; \quad (6)$$

— при расчёте полного термического сопротивления стягивания:

$$a = \sqrt{\frac{A_r}{\pi}}, \quad r = \sqrt{\frac{A_n}{\pi}}. \quad (7)$$

Соотношения (6), (7) обеспечивают следующие пределы сопротивления стягивания:

— для удельного значения

$$\lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} R_{th,cn} = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{\pi a}{4\lambda} = 0,$$

$$\lim_{\substack{a \rightarrow r \\ A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} R_{th,cn} = \lim_{\substack{a \rightarrow r \\ A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} \frac{a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) = 0;$$

— для абсолютного значения

$$\lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} R_{th, cn, a} = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{1}{2\pi n_r \lambda_c a} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) =$$

$$= \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{1}{4n_r \lambda_c a} = \infty,$$

$$\lim_{\substack{A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} R_{th, cn, a} = \lim_{\substack{A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} \frac{1}{2\pi n_r \lambda_c a} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) = 0.$$

Поскольку практически на любых материалах, получаемых или обрабатываемых в атмосфере, присутствуют поверхностные плёнки, зона контакта химически неоднородна, что приводит к необходимости включения в эквивалентную схему сопротивления плёнок последовательно с сопротивлениями самих материалов (см. рис. 4):

$$R_{th, c} = (R_{th, f, 1} + R_{th, f, 2}) + (R_{th, cn, 1} + R_{th, cn, 2}) =$$

$$= R_{th, f} + R_{th, cn},$$

где термические сопротивления плёнок $R_{th, f, 1}$, $R_{th, f, 2}$ определяются отношением их средних толщин $\delta_{f, 1}$, $\delta_{f, 2}$ к теплопроводностям $\lambda_{f, 1}$, $\lambda_{f, 2}$:

$$R_{th, f, 1} = \frac{\delta_{f, 1}}{\lambda_{f, 1}}, \quad R_{th, f, 2} = \frac{\delta_{f, 2}}{\lambda_{f, 2}}.$$

Для нахождения средних толщин плёнок может быть использован метод, основанный на измерении электрического сопротивления контакта [50].

При необходимости проведения тепловых расчётов с повышенной точностью в схему, изображённую на рис. 4, добавляются сопротивления тесных контактов на каждой границе двух материалов. Однако вследствие малых значений этих сопротивлений связанные с ними экспериментальные исследования затруднены, а теоретические методы их расчёта только появляются в литературе [53]. Термическое сопротивление тесного контакта может быть определено как

$$R_{th, i, 12} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta_1 T + \delta_2 T}{q} \right) =$$

$$= \frac{1}{2N_A^{1/3}} \left[\frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{M_1}{\rho_1} \right)^{1/3} + \frac{1}{\lambda_2} \left(\frac{M_2}{\rho_2} \right)^{1/3} \right], \quad (8)$$

где N_A — постоянная Авогадро, моль⁻¹; M_1 , M_2 — молярные массы, кг моль⁻¹; λ_1 , λ_2 — теплопроводности, Вт(мК)⁻¹; ρ_1 , ρ_2 — плотности материалов 1 и 2, кг м⁻³.

Поскольку термическое сопротивление тесного контакта ($\sim 10^{-11}$ м² К Вт⁻¹) на несколько порядков меньше сопротивления стягивания ($\sim 10^{-4}$ м² К Вт⁻¹), именно эффект стягивания определяет контактную термическую проводимость при отсутствии среды в зазорах. Термическое сопротивление стягивания может быть представлено произведением отношения толщины возмущённой зоны δ_{cn} к теплопроводности λ и функции Φ , зависящей от соотношения фактической и номинальной площадей [54]:

$$R_{th, cn} = \frac{\delta_{cn}}{\lambda} \Phi = \frac{\delta x N_{cn}}{\lambda} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) =$$

$$= \frac{1}{N_A^{1/3}} \frac{1}{\lambda} \left(\frac{M}{\rho} \right)^{1/3} N_{cn} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right), \quad (9)$$

где $N_{cn} \approx 0,5 \times 10^7$ — число молекулярных слоёв в возмущённой зоне, которое изменяется в зависимости от материала, δx — минимальное дискретное изменение координаты, равное толщине атомного слоя. Тогда

$$R_{th, cn, 12} = R_{th, r, 12} + \frac{1}{N_A^{1/3}} \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{M_1}{\rho_1} \right)^{1/3} N_{cn} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) +$$

$$+ \frac{1}{N_A^{1/3}} \frac{1}{\lambda_2} \left(\frac{M_2}{\rho_2} \right)^{1/3} N_{cn} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) = R_{th, r, 12} +$$

$$+ R_{th, cn, 1} + R_{th, cn, 2} = R_{th, r, 12} + R_{th, cn, 12}. \quad (10)$$

Эффект стягивания происходит в зонах возмущения, средние температуры которых близки к средней температуре контакта $\bar{T}_{c, r, 12}$, поэтому теплопроводности и плотности материалов в первом приближении берутся именно при этой температуре и имеют смысл теплофизических свойств зон возмущения:

$$\lambda_1 = \lambda_1(\bar{T}_{c, r, 12}), \quad \lambda_2 = \lambda_2(\bar{T}_{c, r, 12}).$$

Согласно (9) термическое сопротивление стягивания имеет следующие пределы:

— для удельного значения

$$\lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} R_{th, cn} = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{\delta x N_{cn}}{\lambda} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) = \infty,$$

$$\lim_{\substack{A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} R_{th, cn} = \lim_{\substack{A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} \frac{\delta x N_{cn}}{\lambda} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) = 0;$$

— для абсолютного значения

$$\lim_{\substack{A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} R_{th, cn, a} = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{\delta x N_{cn}}{A_r \lambda} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) = \infty,$$

$$\lim_{\substack{A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} R_{th, cn, a} = \lim_{\substack{A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} \frac{\delta x N_{cn}}{A_r \lambda} \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) = 0.$$

В то время как в (9) толщина возмущённой зоны предполагается постоянной, в (5) реализуется другой подход, в котором функция стягивания не используется, а $R_{th, cn}$ определяется как величина, прямо пропорциональная толщине возмущённой зоны δ_{cn} . В этом случае толщина зоны возмущения и, следовательно, термическое сопротивление стягивания зависят от соотношения фактической и номинальной площадей и имеют экстремум при $A_r/A_n \approx 0,201$ (рис. 5). В результате в области малых контактных давлений уменьшение фактической площади должно сопровождаться уменьшением сопротивления стягивания, а её нулевому значению должно соответствовать нулевое значение $R_{th, cn}$. В обеих методиках абсолютные сопротивления стягивания $R_{th, cn, a}$ стремятся к бесконечности при уменьшении фактической контактной площади в области малых давлений и достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными для средних и высоких давлений. Между тем вопрос о существовании экстремума возмущённой зоны является принципиальным и требует экспериментальной проверки, так как указанные методики приводят к разным пределам сопротивления стягивания в области малых давлений (ср. рис. 5, 6).

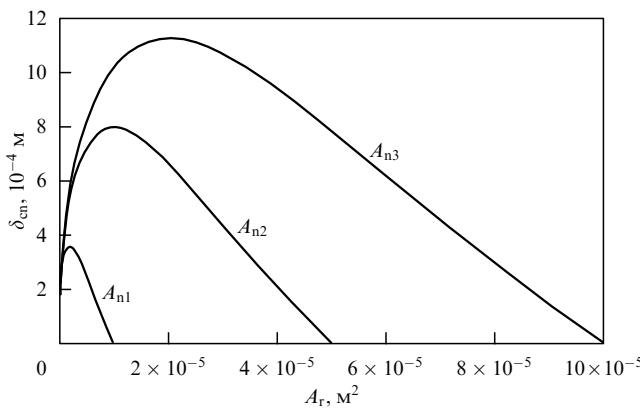


Рис. 5. Толщина возмущённой зоны в зависимости от площади фактического контакта для различных значений номинальной площади: $A_{n1} = 10^{-5} \text{ м}^2$, $A_{n2} = 5 \times 10^{-5} \text{ м}^2$, $A_{n3} = 10^{-4} \text{ м}^2$.

Возможен и третий подход, обеспечивающий как бесконечно большое удельное сопротивление стягивания при нулевом значении фактической контактной площади, так и экстремум толщины возмущённой зоны в области малых контактных давлений. Этот подход объединяет две рассмотренные выше методики, используя определение толщины зоны возмущения из (5) и функцию стягивания из (9) (Φ может быть и другой):

$$\begin{aligned} R_{\text{th}, \text{cn}} &= \frac{\delta_{\text{cn}}}{\lambda} \Phi = \frac{a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right) = \\ &= \frac{1}{2\lambda} \sqrt{\frac{A_r}{\pi}} \arctan \left(\sqrt{\frac{A_n}{A_r}} - 1 \right) \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{A_r}{A_n} \right). \quad (11) \end{aligned}$$

Тогда получаем следующие пределы:

— для удельного значения

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} R_{\text{th}, \text{cn}} &= \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{a^2}{r^2} \right) = \\ &= \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{\pi a}{4\lambda} \frac{\cos [\pi a^2/(2r^2)]}{\sin [\pi a^2/(2r^2)]} = \frac{1}{2\lambda} \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{r^2}{a} = \infty, \\ \lim_{\substack{a \rightarrow r \\ A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} R_{\text{th}, \text{cn}} &= \lim_{\substack{a \rightarrow r \\ A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} \frac{a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{a^2}{r^2} \right) = 0; \end{aligned}$$

— для абсолютного значения

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} R_{\text{th}, \text{cn}, a} &= \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ A_r \rightarrow 0 \\ n_r \rightarrow 0}} \frac{1}{2\pi n_r \lambda a} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \times \\ &\quad \times \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{a^2}{r^2} \right) = \infty, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{a \rightarrow r \\ A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} R_{\text{th}, \text{cn}, a} &= \lim_{\substack{a \rightarrow r \\ A_r \rightarrow A_n \\ n_r \rightarrow 1}} \frac{1}{2\pi n_r \lambda a} \arctan \left(\frac{r}{a} - 1 \right) \times \\ &\quad \times \cot \left(\frac{\pi}{2} \frac{a^2}{r^2} \right) = 0. \end{aligned}$$

Несмотря на преимущества аналитических методик определения термического сопротивления реального контакта, связанные с возможностью физически обоснованного расчёта его величины, необходимость вычисления большого количества различных параметров не позволяет быстро получить приближённые значения, что важно в инженерной практике. По этой причине в расчётах контактного теплообмена распространены полуэмпирические зависимости, позволяющие найти интегральное контактное термическое сопротивление без исследования особенностей его структуры.

Одна из таких методик позволяет рассчитывать теплообмен в контактах разнородных материалов, учитывая микроскопические и макроскопические параметры. Полная контактная проводимость $\alpha_{\text{th}, \text{c}}$ представляется как сумма термических проводимостей через контактные пятна твёрдых тел $\alpha_{\text{th}, \text{cn}}$ и среду в межконтактных зазорах $\alpha_{\text{th}, \text{m}}$,

$$\alpha_{\text{th}, \text{c}} = \alpha_{\text{th}, \text{cn}} + \alpha_{\text{th}, \text{m}}.$$

Слагаемые в правой части последнего соотношения вычисляются с помощью следующих эмпирических зависимостей [31, 48, 49, 55]:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{th}, \text{cn}} &= \eta_1 \lambda_c \left(\frac{P_n}{H} \right)^{\eta_2} \left(\frac{m}{\sigma} \right)^{\eta_3}, \\ \eta_1 &= 1,25, \quad \eta_2 = 0,95, \quad \eta_3 = 1,00 \quad [31, 55], \\ \eta_1 &= \frac{2}{\pi \chi}, \quad \chi = 0,36, \quad \eta_2 = 1 + 0,071 c_2, \quad \eta_3 = 1,00 \quad [48, 49], \\ \alpha_{\text{th}, \text{m}} &= \frac{\lambda_m}{A + \Gamma}, \end{aligned} \quad (12)$$

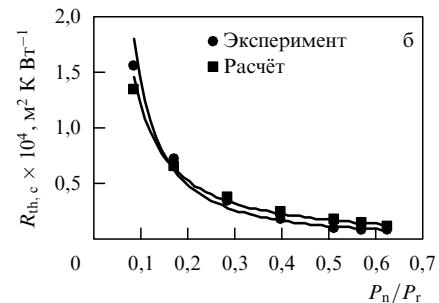
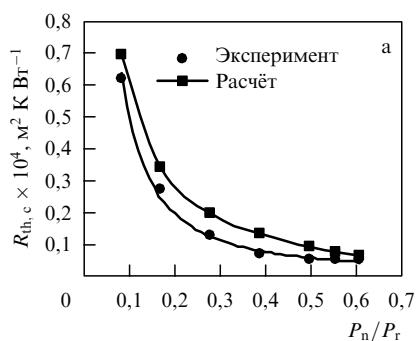


Рис. 6. Экспериментальные и расчётные значения контактного термического сопротивления (пластичный контакт): (а) для контактной пары Cu-Al при средней контактной температуре 333 К, (б) для контактной пары Fe-Al при средней контактной температуре 348 К.

где P_n — номинальное контактное давление, Па; $\lambda_c = 2\lambda_1\lambda_2/(\lambda_1 + \lambda_2)$ — средняя геометрическая теплопроводность взаимодействующих материалов, Вт(м К) $^{-1}$; λ_m — теплопроводность среды в межконтактных зазорах, Вт(м К) $^{-1}$; $\sigma = (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)^{1/2}$ — приведённая шероховатость поверхности, м; $m = (m_1^2 + m_2^2)^{1/2}$ — средний приведённый угол микронеровности. Расстояние A [м] между средними плоскостями поверхностей определяется выражением

$$A = 1,53 \left(\frac{P_n}{H} \right)^{-0,097} \sigma.$$

Газовый параметр Γ определяется произведением приведённого коэффициента аккомодации α , параметра β и среднего пути пробега молекул Λ в зазорах:

$$\Gamma = \alpha\beta\Lambda, \quad \alpha = \frac{2 - \alpha_1}{\alpha_1} + \frac{2 - \alpha_2}{\alpha_2},$$

$$\beta = \frac{2\gamma}{\text{Pr}(\gamma + 1)}, \quad \Lambda = \Lambda_0 \frac{P_0}{P} \frac{T}{T_0},$$

где α_1, α_2 — коэффициенты аккомодации на границах поверхностей твёрдых тел со средой в зазорах; T — температура среды в зазорах, К; P_0 — давление среды в зазорах при комнатной температуре T_0 , Па; Pr — критерий Прандтля для среды в зазорах; γ — степень тепла (статистический коэффициент).

Поверхностная микротвёрдость H , которая значительно превышает значение по Бринелю, зависит от ряда параметров: средней шероховатости поверхности σ , среднего абсолютного угла неровностей $m \approx \tan m \sim 0,01-0,1$ (угол наклона образующей конуса микронеровности) материала, метода обработки поверхностей, приложенного давления, контактной температуры. Поверхностная микротвёрдость H вычисляется относительно номинального контактного давления P_n [48, 49]:

$$\frac{P_n}{H} = \left(\frac{P_n}{H'} \right)^{1/1+0,071c_2}, \quad H' = c_1 \left(\frac{1,62\sigma}{m\sigma_0} \right),$$

где $\sigma_0 = 10^{-6}$ м; c_1, c_2 — коэффициенты микротвёрдости по Виккерсу:

$$c_1 = H_{\text{BGM}}(4,0 - 5,77k + 4,0k^2 - 0,61k^3),$$

$$c_2 = -0,57 + \left(\frac{1}{1,22} \right) k - \left(\frac{1}{2,42} \right) k^2 + \left(\frac{1}{16,58} \right) k^3,$$

$$k = \frac{H_{\text{B}}}{H_{\text{BGM}}},$$

$H_{\text{BGM}} = 3,178 \times 10^9$ Па, H_{B} — микротвёрдость по Бринелю, Па. Данное приближение справедливо в диапазоне $1,3 \times 10^9 \leq H_{\text{B}} \leq 7,6 \times 10^9$ Па. Если фактическое значение поверхностной микротвёрдости H_e известно, то коэффициенты микротвёрдости находятся как $c_1 = H_e$, $c_2 = 0$.

Для расчёта термической проводимости фактического контакта с учётом сопротивления стягивания также используется полуэмпирическая зависимость [6, 32, 35], полученная в результате обобщения обширных экспериментальных данных, позволяющая получить достаточно достоверные значения для широкого круга материалов:

$$\lambda_{\text{th,s}} = 1,15 \times 10^4 \lambda_{\text{eq}} \left(\frac{P_n^2}{\Omega_b E} \frac{T_c}{T_{\text{melt}}} K^2 \right)^{0,302}, \quad (13)$$

$$\lambda_{\text{eq}} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{\sigma_1/\lambda_1 + \sigma_2/\lambda_2},$$

где λ_{eq} — эквивалентная теплопроводность контактирующих материалов, Вт(м К) $^{-1}$; h_1, h_2 — средние высоты микронеровностей взаимодействующих поверхностей, м; P_n — номинальное контактное давление, Па; Ω_b — предел прочности более мягкого материала, Па; E — модуль упругости контактирующих материалов, Па; T_c — средняя контактная температура, К; T_{melt} — температура плавления более легкоплавкого материала, К; $E = 2E_1E_2/(E_1 + E_2)$ — приведённый модуль упругости, Па; E_1, E_2 — модули упругости материалов, Па; K — коэффициент, показывающий изменение геометрических характеристик соприкасающихся поверхностей, зависящий от среднего арифметического отклонения профиля следующим образом:

$$K = 1 \text{ при } (\sigma_1 + \sigma_2) > 3 \times 10^{-5} \text{ м},$$

$$K^2 = \left(\frac{30 \times 10^{-6}}{\sigma_1 + \sigma_2} \right)^{2/3} \text{ при } 10^{-5} < \sigma_1 + \sigma_2 \leq 3 \times 10^{-5} \text{ м},$$

$$K = \frac{15 \times 10^{-6}}{\sigma_1 + \sigma_2} \text{ при } \sigma_1 + \sigma_2 \leq 10^{-5} \text{ м}.$$

Результаты сравнения расчётных значений контактного термического сопротивления, полученного по формуле (13), с экспериментальными данными для ряда плоских образцов в вакууме [35] приведены в табл. 1. Результаты расчётов показывают, что при доверительной вероятности 0,95 погрешность вычисления терми-

Таблица 1. Экспериментальные значения контактного термического сопротивления при $P_n = 5 \times 10^5$ Па, $T_c = 550$ К

Материал контактной пары	Геометрия поверхностей						λ_{eq}	Расчётное $R_{\text{th,c}}$	Экспериментальное $R_{\text{th,c}}$
	$R_{\text{a}1}$	$R_{\text{a}2}$	R_1	R_2	a	ψ			
	10^{-6} м								
X18H8T–X18H9T	1,15	0,68	47	180	6,2	0,989	21,1	20,5	23,1
X18H8T–X18H9T	0,46	0,40	510	718	9,4	0,982	21,1	13,1	18,4
X18H8T–X18H9T	0,38	0,42	890	628	12,0	0,968	21,1	12,4	14,0
Mo–X18H9T	0,48	0,40	580	736	9,8	0,986	42,0	37,4	25,3
X18H9T–Cu	0,52	1,26	148	43	14,0	0,972	64,3	3,38	4,8

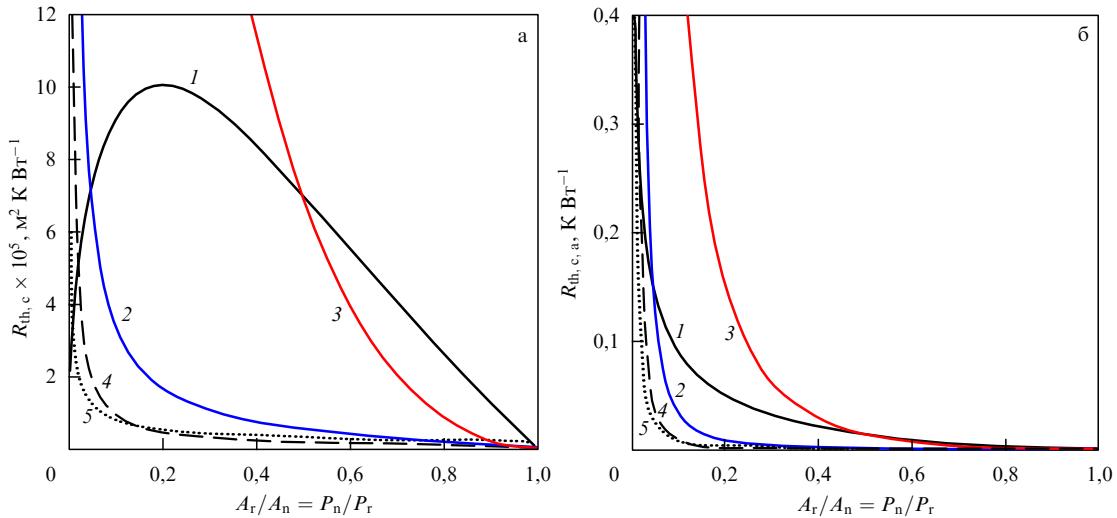


Рис. 7. Контактное термическое сопротивление пары Al–Al в вакууме при пластическом контакте ($T_c = 550$ К, $A_n = 10^{-2}$ м, $S_m = 10^{-5}$ м, $t_m = 0,8$, класс чистоты 9в ($R_a = 0,2 \times 10^{-6}$ м, $R_z = 10^{-6}$ м>): (а) удельное значение, рассчитанное по (5) — 1, (9) — 2, (11) — 3, (12) — 4, (13) — 5; (б) полное значение (отнесённое для стягивания к фактической площади контакта A_r , найденной по [44]), рассчитанное по (5) — 1, (9) — 2, (11) — 3, (12) — 4, (13) — 5.

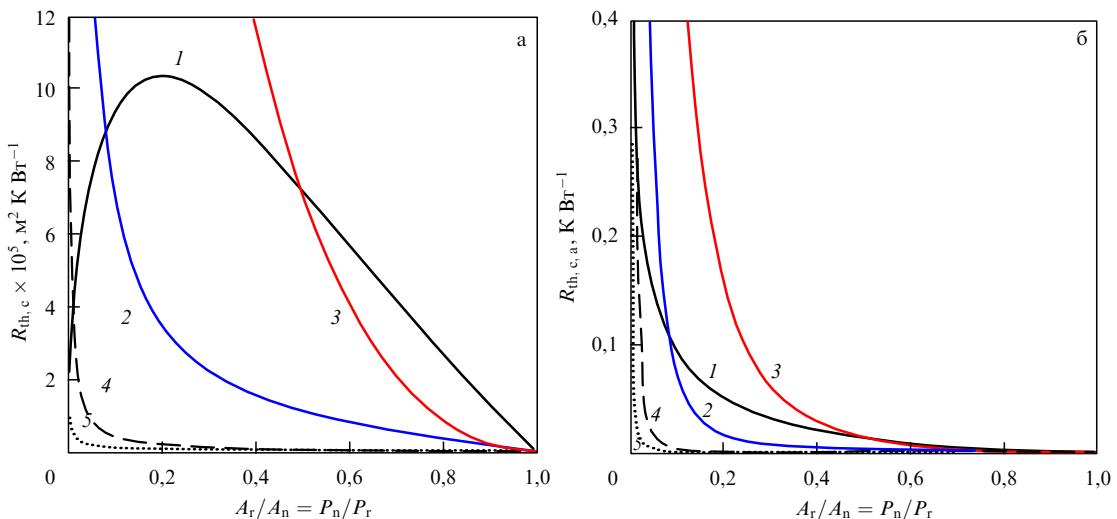


Рис. 8. Контактное термическое сопротивление пары Al–Al в вакууме при упругом контакте ($T_c = 293$ К, $A_n = 10^{-2}$ м, $S_m = 10^{-5}$ м, $t_m = 0,8$, класс чистоты 14в ($R_a = 0,006 \times 10^{-6}$ м, $R_z = 0,032 \times 10^{-6}$ м>): (а) удельное значение, рассчитанное по (5) — 1, (9) — 2, (11) — 3, (12) — 4, (13) — 5; (б) полное значение (отнесённое для стягивания к фактической площади контакта A_r , найденной по [44]), рассчитанное по (5) — 1, (9) — 2, (11) — 3, (12) — 4, (13) — 5.

ческого сопротивления контакта не превышает 52 %. Различие расчётных и опытных результатов объясняется погрешностями экспериментального определения $R_{th,c}$, измерения геометрических характеристик и допущениями, принятыми при использовании аналитических соотношений. В частности, как в (12), так и в (13) присутствует фиктивная величина (в (12) — приведённая теплопроводность материалов λ_c , в (13) — эквивалентная теплопроводность λ_{eq}), которая необходима для того, чтобы учсть разрыв теплопроводности в зоне контакта.

На рисунках 7, 8 приведены результаты расчёта контактных термических сопротивлений для пластического и упругого соединения пары Al–Al в вакууме с одинаковыми классами чистоты взаимодействующих поверхностей. Термическое сопротивление контакта находилось как сумма сопротивлений стягивания в образцах (термическое сопротивление фактического кон-

такта не учитывалось ввиду его малости). Механические свойства и критерий контакта (упругий или пластический) определялись по [44]. Фактическое давление пластического контакта (см. рис. 7) составило $1,082 \times 10^8$ Па, а для упругого контакта (см. рис. 8) — $1,050 \times 10^8$ Па, т.е. при кажущемся сходстве рис. 7 и 8 шкала по оси абсцисс второго растянута по сравнению со шкалой по оси абсцисс первого.

Рассмотренные соотношения были преобразованы к одному и тому же аргументу,

$$\frac{A_r}{A_n} = \frac{P_n}{P_r},$$

следующим образом:

— фактическая контактная площадь выражалась через номинальную, которая постоянна для данного

соединения,

$$A_r = \left(\frac{A_r}{A_n} \right) A_n = \left(\frac{P_n}{P_r} \right) A_n, \quad A_n = \text{const};$$

— номинальное контактное давление выражалось через фактическое, которое постоянно для данного соединения,

$$P_n = \left(\frac{P_n}{P_r} \right) P_r = \left(\frac{A_r}{A_n} \right) P_r, \quad P_r = \text{const}.$$

Номинальная контактная площадь A_n является исходным параметром, характеризующим геометрию рассчитываемой системы, в то время как фактическое контактное давление зависит от температуры, типа соединения (пластическое или упругое) и механических свойств поверхностей материалов [44]:

— при упругом контакте

$$P_r = 2E \frac{R_a}{S_m t_m},$$

где S_m — средний шаг неровностей поверхности профиля, м; t_m — относительная опорная длина профиля на уровне средней линии — отношение суммарной длины отрезков b_{mj} , отсекаемых средней линией выступов профиля в материале, к базовой линии профиля l ,

$$t_m = \frac{1}{l} \sum_{j=1}^n b_{mj};$$

— при пластическом контакте

$$P_r = 0,8H_T.$$

Если известна микротвёрдость H_0 при комнатной температуре, то микротвёрдость H_T при температуре контакта T можно рассчитать по следующей формуле:

$$H_T = H_0 \frac{1 - \Theta^{2/3}}{1 - \Theta_0^{2/3}},$$

где безразмерные температуры Θ , Θ_0 определяются относительно температуры плавления T_{melt} :

$$\Theta = \frac{T}{T_{\text{melt}}}, \quad \Theta_0 = \frac{T_0}{T_{\text{melt}}}.$$

Критерием вида контакта является величина

$$\Pi = \frac{ER_a}{H_T S_m}.$$

Контакт считается пластическим, если $\Pi > 1/4$, и упругим, если $\Pi \leq 1/4$.

В случае теплового взаимодействия разнородных материалов расчёт контактного давления проводится для каждого материала независимо. Фактическая контактная площадь определяется по принципу наименьшего давления: в качестве фактического контактного давления принимается меньшее из рассчитанных. Это обусловлено тем, что менее термостойкий материал деформируется, вызывая увеличение площади контактных пятен. Может оказаться, что один из материалов сохранит упругость при данной температуре в контакте, а другой станет пластичным. В данном случае принцип наименьшего давления сохраняется: фактическим контактным давлением полагается давление материала в пластическом состоянии, которому соответствует большая контактная площадь.

Рассмотренные зависимости позволяют рассчитывать термическое сопротивление в контактах материалов с гладкими шероховатыми поверхностями, средняя высота σ неровностей которых мала по сравнению с толщинами самих образцов. В этих расчётах используется модель "трубки теплового тока" (рис. 9а), фиктивный радиус r которой рассчитывается по (6) для единичного микроконтакта и по (7) в случае полного контактного сопротивления. Предполагается, что стягивание линий теплового потока является одноступенчатым и происходит непосредственно от радиуса трубки теплового тока r к радиусу a площади фактического контакта A_r .

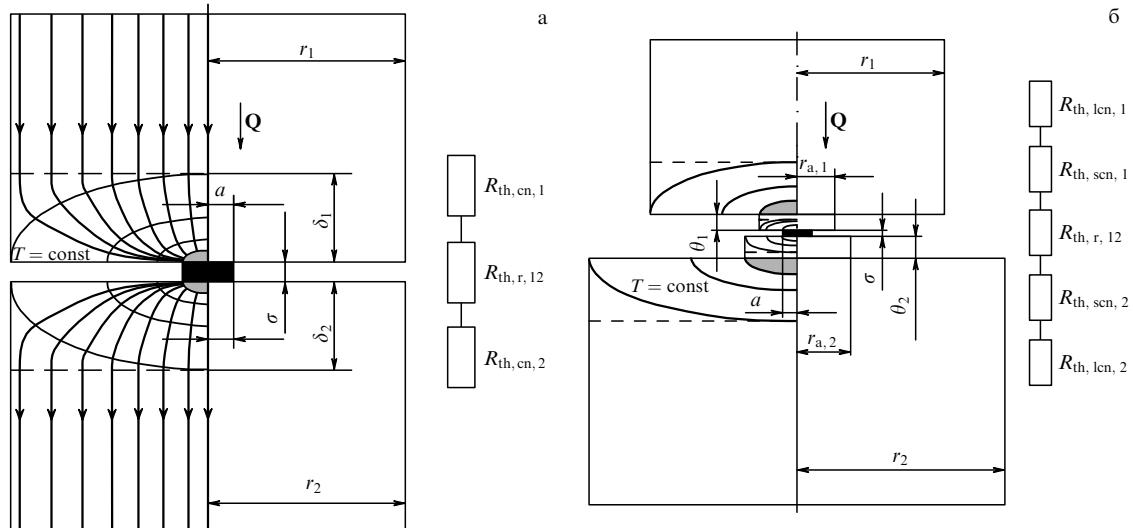


Рис. 9. Трубка теплового тока и схема термического сопротивления: (а) гладкие шероховатые поверхности с равными номинальными площадями — одноступенчатое стягивание; (б) волнистые шероховатые поверхности с различными номинальными площадями — двухступенчатое стягивание.

Такое предположение справедливо только тогда, когда на поверхностях отсутствуют неровности более низкого порядка. Между тем в значительной части прикладных задач рассматриваются поверхности, которым свойственна не только шероховатость, но и волнистость, и стягивание линий теплового потока происходит в два этапа: сначала от номинальной площади A_n с радиусом r к обусловленной контактом волн контурной (кажущейся) площади A_a и только потом к фактической площади с радиусом a (см. рис. 2). Трубка теплового тока в этом случае усложняется и становится двухступенчатой (рис. 9б). Термическое сопротивление стягивания $R_{th, cn}$ определяется теперь суммой последовательных сопротивлений макростягивания $R_{th, lcn}$ и микростягивания $R_{th, scn}$:

$$R_{th, cn} = R_{th, lcn} + R_{th, scn}.$$

Преимуществом аналитических моделей (5), (9), (11) является возможность их применения при расчёте как макростягивания, так и микростягивания. Для этого достаточно введения промежуточного фиктивного радиуса r_a контурной площади и рассмотрения стягивания по схеме $A_n(r) \rightarrow A_a(r_a) \rightarrow A_r(a)$. Например, уравнение (5) для волнистой шероховатой поверхности преобразуется в следующее:

$$\begin{aligned} R_{th, cn} &= \frac{r_a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r}{r_a} - 1 \right) + \frac{a}{2\lambda} \arctan \left(\frac{r_a}{a} - 1 \right) = \\ &= \frac{1}{2\lambda} \left[r_a \arctan \left(\frac{r}{r_a} - 1 \right) + a \arctan \left(\frac{r_a}{a} - 1 \right) \right] = \\ &= \frac{\delta_{lcn} + \delta_{scn}}{\lambda} = \frac{\delta_{cn}}{\lambda}, \end{aligned}$$

где δ_{lcn} , δ_{scn} — толщины плоских стенок, термически эквивалентных возмущённым зонам, образующимся при макро- и микростягивании.

Возможен и третий случай, соответствующий волнистым нешероховатым поверхностям, при взаимодействии которых имеет место только макростягивание. Полноту исключить шероховатость практически невозможно, однако и в этом случае можно записать аналитическое выражение сопротивления стягивания — оно совпадает с (5), — считая, что кажущаяся площадь равна фактической: $A_a(r_a) = A_r(a)$, $r_a = a$.

Кроме того, возможны и комбинированные случаи взаимодействия гладких шероховатых и волнистых шероховатых поверхностей, при которых трубка теплового тока в одном теле является одноступенчатой, а в другом — двухступенчатой. Различными могут быть и площади номинальных сечений взаимодействующих материалов. Аналитические выражения позволяют рассчитывать сопротивления стягивания в каждом теле отдельно, поэтому легко могут быть адаптированы для любого вида взаимодействия.

Эмпирические зависимости строятся, как правило, для тел с равными номинальными площадями отдельно для макро- и микростягивания. Так, (12) и (13) позволяют рассчитывать только микростягивание, поэтому при наличии волнистости требуется применение дополнительных выражений. Например, термическое сопротивление макростягивания в контакте двух сферических поверхностей с радиусами ρ_1 , ρ_2 ($\rho \gg \sigma$) может быть

найдено как [48, 49]

$$R_{th, lcn, a} = \frac{1}{2\lambda_c r_a} \left(1 - \frac{r_a}{r} \right)^{3/2}. \quad (14)$$

Удельное сопротивление $R_{th, lcn}$ определяется произведением $R_{th, lcn, a}$ и контурной площади A_a :

$$\begin{aligned} R_{th, lcn} &= R_{th, lcn, a} A_a = \frac{A_a}{2\lambda_c r_a} \left(1 - \frac{r_a}{r} \right)^{3/2} = \\ &= \frac{\pi r_a^2}{2\lambda_c r_a} \left(1 - \frac{r_a}{r} \right)^{3/2} = \frac{\pi r_a}{2\lambda_c} \left(1 - \frac{r_a}{r} \right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Радиус r_a контурной площади A_a равен

$$r_a = \left(\frac{3N\rho}{4E'} \right)^{1/3},$$

где фиктивные значения радиуса кривизны ρ и модуля упругости E' вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho &= \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right)^{-1}, \\ E' &= \left(\frac{1 - v_1^2}{E_1} + \frac{1 - v_2^2}{E_2} \right)^{-1}, \end{aligned}$$

E_1 , E_2 — модули упругости материалов контактной пары, Па; v_1 , v_2 — коэффициенты Пуассона. Если номинальные площади образцов различны, то термическое сопротивление стягивания в контакте сферических поверхностей принимает вид [48, 49]

$$R_{th, lcn, a} = \frac{1}{4\lambda_1 r_a} \left(1 - \frac{r_a}{r_1} \right)^{3/2} + \frac{1}{4\lambda_2 r_a} \left(1 - \frac{r_a}{r_2} \right)^{3/2}, \quad (16)$$

$$R_{th, lcn} = \frac{\pi r_a}{4\lambda_1} \left(1 - \frac{r_a}{r_1} \right)^{3/2} + \frac{\pi r_a}{4\lambda_2} \left(1 - \frac{r_a}{r_2} \right)^{3/2}. \quad (17)$$

Поскольку (14)–(17) основаны на модели трубы теплового тока, они могут быть обобщены и использованы для расчёта как термических сопротивлений более широкого класса волнистых поверхностей, так и сопротивлений микростягивания, что становится возможным, если r_a в них заменить параметром a . Если при этом рассматривать в (17) коэффициент $\pi/2$ как предельное значение арктангенса в (5), а $(1 - a/r)^{3/2}$ как функцию стягивания Φ в (9), то получаем выражение (11) в общем виде (выше отмечалось, что Φ может быть иной).

Таким образом, основной проблемой термического расчёта волнистых шероховатых поверхностей является определение кажущейся контактной площади A_a и соответствующего ей фиктивного радиуса r_a (методика расчёта A_a изложена в [44]). Причём, аналитические выражения для сопротивления стягивания имеют ряд преимуществ, к которым, в первую очередь, относится их инвариантность для макро- и микростягивания, возможность отдельного расчёта взаимодействующих тел и связанная с ней применимость для систем, состоящих из тел с разными номинальными площадями. Эмпирические зависимости могут служить критериями оценок аналитических моделей, полученных в результате обобщения обширного экспериментального материала. В частности,

эмпирические зависимости (12) построены более чем по 600 точкам, соответствующих широкому спектру материалов и классов чистоты поверхностей [48, 49].

Рассмотренные аналитические выражения дают значения, превышающие эмпирические. Возможно, это связано с принятием максимального значения коэффициента формы $\psi = 1$, соответствующего круглым пятнам. Отсюда следует необходимость дальнейшего изучения аналитических моделей и их возможностей.

4. Выпрямление теплового потока

Во всех приведённых соотношениях (4), (5), (9), (11)–(17) контактное термическое сопротивление выражается через теплофизические свойства материалов, их механические и геометрические характеристики или связанные с ними параметры. При изменении направления теплового потока посредством перестановки значений температур на внешних границах системы изменяется средняя контактная температура и в результате изменяются сопротивления теплопроводности слоёв материалов и возмущённых зон. Иными словами, наблюдается эффект асимметрии теплового потока или термическое выпрямление. Существенно проявляется и зависимость термо-механических свойств от температуры: из-за различия коэффициентов линейного расширения материалов фактическая контактная площадь будет изменяться при инверсии теплового потока, что отразится на соотношении его величин в прямом и обратном направлении. Экспериментальные данные, полученные независимо разными исследователями [28, 48, 49, 55, 56], также указывают на существенные проявления этого эффекта.

Изменение величины теплового потока при перестановке граничных условий первого рода в сложных теплофизических системах, состоящих из двух и более объектов, находящихся в реальном контакте, наблюдается в двух характерных случаях [28]:

- тепловое соединение состоит из различных материалов с одинаковыми или разными поверхностными свойствами;

- в контакте находятся идентичные материалы с различными поверхностными свойствами.

Отсюда следуют выводы, определяющие причины выпрямления теплового потока. С одной стороны, этот эффект обусловлен различием в теплофизических свойствах взаимодействующих материалов и зависимостью данных свойств от температуры. Измерение асимметрии для контактных пар латунь ММ59–железо "Армко" и сталь 1Х18Н9Т–алунд, соединённых диффузионной сваркой, показало, что отношение прямого теплового потока Q_1 к обратному Q_r изменяется от 1,02 до 1,4 и воспроизводится при измерении по прошествии значительного времени (нескольких месяцев). Некоторые результаты данной экспериментальной работы приведены в табл. 2 [56].

Поскольку опытные данные получены для образцов, соединённых практически идеально (диффузионная сварка), отношение тепловых потоков примерно совпадает с отношением их плотностей, т.е. влияние фактической площади контакта, а следовательно, механических и поверхностных свойств на изучаемый эффект в рассматриваемом случае можно принять незначительным. Так как термическое сопротивление многослойной стенки с идеальными контактами между слоями зависит только

Таблица 2. Результаты измерений эффекта асимметрии потоков тепла

Исследуемый двухкомпонентный образец	Латунь ММ59–железо "Армко"	Сталь 1Х18Н9Т–алунд	
Температура на поверхности 1, °C	352,8	320,5	300,0
Температура на поверхности 2, °C	224,1	152,0	80,0
Разность температур на внешних поверхностях образцов, °C	128,7	168,5	220,0
$\frac{Q_1}{Q_r} \approx \frac{q_1}{q_r}$	1,0533	1,0955	1,2088
			1,2582

от разности температур на внешних поверхностях ΔT , толщин δ_m и теплопроводностей λ_m слоёв [6]:

$$R_{th} = \frac{\Delta T}{\sum_{m=1}^M \lambda_m / \delta_m},$$

где M — число слоёв (в данном случае 2), а толщины слоёв в процессе эксперимента не изменились, то приведённые результаты доказывают зависимость термического выпрямления от теплопроводности:

$$K = \frac{\delta_1 \lambda_2}{\delta_2 \lambda_1}.$$

Коэффициент K является безразмерной переменной, которая используется как аргумент безразмерной функции $f(K)$, представляющей собой отношение прямого теплового потока Q_1 к обратному Q_r :

$$f(K) = \frac{Q_1}{Q_r}. \quad (18)$$

Теоретическая зависимость $f(K)$ для некоторой двухкомпонентной системы при постоянной разности температур на внешних поверхностях ΔT показана на рис. 10 [56]. Для данной контактной пары существует оптимальное значение K_0 , приблизиться к которому можно,

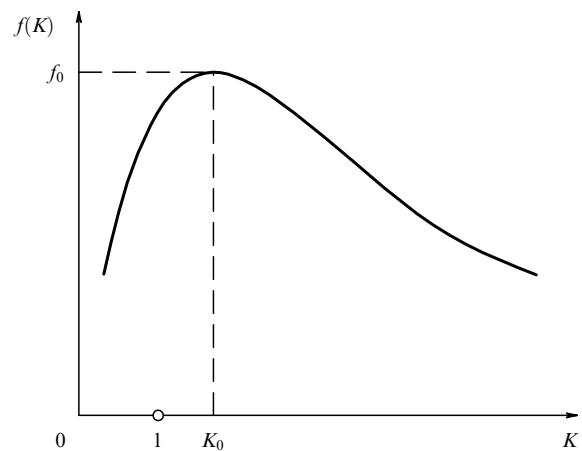


Рис. 10. Теоретическая зависимость $f(K)$ для контактной пары при $\Delta T = \text{const}$.

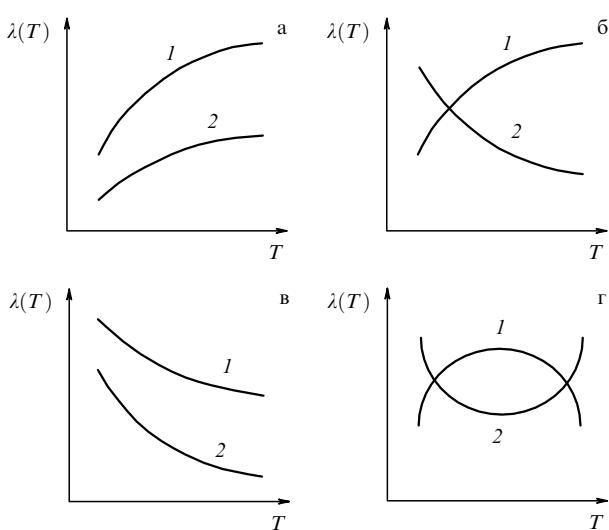


Рис. 11. Варианты изменения теплопроводностей материалов контактной пары в зависимости от температуры.

варьируя толщины материалов δ_1 и δ_2 . При этом будут изменяться и средние теплопроводности слоёв вследствие изменения их средних температур, так как при сохранении температур на внешних поверхностях средняя температура в контакте будет непостоянна.

Значение f_0 изменяется также в зависимости от соотношения теплопроводностей материалов контактной пары. Возможные варианты поведения теплопроводности как функции температуры показаны на рис. 11. Максимальные значения f_0 , при которых выпрямление теплового потока наиболее значительно, соответствуют случаю рис. 11б, в котором характеры изменения теплопроводностей противоположны друг другу. В случаях рис. 11а, в эффект выпрямления будет не столь значителен, а в случае рис. 11г могут наблюдаться различные результаты в зависимости от задаваемых температур. Отсюда следует, что при необходимости подбора контактной пары, обеспечивающей максимальный и стабильный эффект выпрямления теплового потока, необходимо, во-первых, использовать материалы, теплопроводность которых значительно изменяется как функция температуры и соответствует случаю рис. 8б, и, во-вторых, выбирать толщины материалов, соответствующие оптимальному значению коэффициента K .

С другой стороны, выпрямление теплового потока в контакте одинаковых материалов с разными поверхностными свойствами указывает на зависимость эффекта от поверхностных и механических свойств. Экспериментально установлено, что [28]:

- упругие деформации не приводят к ощутимому изменению порядка эффекта в результате длительной циклической инверсии температур на внешних границах системы, в то время как пластические вызывают его уменьшение после нескольких циклов;
- термическое выпрямление увеличивается с возрастанием контактного давления;
- выпрямление теплового потока уменьшается из-за присутствия поверхностных микронеровностей;
- изменение поверхностных свойств и тепловой нагрузки оказывает существенное влияние на данный эффект.

Выявляя те или иные закономерности, экспериментальные работы не могут дать ответ на вопрос о физических основах термического выпрямления из-за большого разброса опытных данных, связанного с широким спектром материалов и поверхностных характеристик образцов. Поэтому для физического обоснования экспериментальных данных необходимо теоретическое изучение проблемы.

Каждая из вышеприведённых подгрупп теоретических работ даёт свою интерпретацию термического выпрямления. Электронная теория объясняет выпрямление теплового потока влиянием потенциального барьера, образующегося в контакте разнородных металлов, на электронный тепловой поток, считая, что фононная проводимость не имеет свойства направленности. Если $E_{w,1}, E_{w,2}$ — рабочие функции металлических поверхностей и $E_{w,1} < E_{w,2}$, то поток электронов будет направлен из металла 1 в металл 2, так как на границе проводимости металла 1 электроны ближе к уровню потенциального барьера. Если $E_{w,1} > E_{w,2}$, то поток электронов соответственно будет направлен из металла 2 в металл 1. Поскольку рабочие функции зависят от геометрии поверхности, свойств поверхностных пленок и материалов образцов, термическое выпрямление должно быть функцией и этих параметров [38, 51, 57]. Хотя последнее утверждение верно, электронная теория никак не объясняет выпрямление теплового потока в однородном контакте, где носители заряда во взаимодействующих металлах находятся на одном и том же энергетическом уровне. Кроме того, исходя из электронной теории невозможно объяснить эффект выпрямления в контакте неметаллов, где присутствует только фононная теплопроводность. Отсюда следует, что гипотеза этой теории о влиянии на термическое выпрямление потенциального барьера, связанного с разностью работ выхода взаимодействующих металлов, применима только к электронной теплопроводности в контактах металлов и полупроводников.

Те же выводы можно сделать и в отношении "пленочных" теорий, относящих эффект выпрямления теплового потока к влиянию поверхностных пленок [13]. Диэлектрические и полупроводниковые пленки действительно представляют собой значительный потенциальный барьер для носителей электрического тока и имеют существенное электрическое сопротивление [16]. Однако термическое сопротивление пленок вследствие их крайне малых толщин, как правило, незначительно, а его изменение при инверсии теплового потока, составляющее не более нескольких процентов от среднего сопротивления пленки, мало по сравнению с суммарным сопротивлением контакта и его фононными составляющими. Поскольку изменение теплового потока при инверсии граничных температур может достигать 40 % [27], ответственным за тепловое выпрямление является фононная составляющая контактного термического сопротивления, хотя на электронную теплопроводность влияние пленок может быть и значительным.

"Микроскопические" и "макроскопические" теории, основанные на зависимости контактной проводимости от поверхностных и механических свойств, объясняют эффект выпрямления изменением микро- и макроплощадей контакта, приводящим к изменению сопротивлений микро- и макростягивания. В зависимости от поверхностной структуры материалов контакты делятся на

волнистые, средняя высота шероховатости которых на несколько порядков меньше средней высоты волнистости, и шероховатые, волнистость которых сопоставима с шероховатостью, т.е. взаимодействующие поверхности близки к идеальным плоскостям. Считается, что в первом случае большая термическая проводимость соответствует направлению теплового потока из материала с меньшей теплопроводностью, а во втором — в материал с меньшей теплопроводностью [51, 58].

Продолжением теории микро- и макростягивания являются техники расчёта контактного теплообмена, учитывающие влияние термического напряжения в интерфейсе на фактическую площадь контакта. Термическое напряжение пропорционально произведению коэффициента линейного расширения материала β и разности ΔT максимальной и минимальной температур на контактной поверхности образца [51, 59]:

$$\varepsilon \sim \beta \Delta T.$$

Так как ΔT обратно пропорциональна теплопроводности материала λ ,

$$\varepsilon \sim \frac{\beta}{\lambda}.$$

Опытные данные показали, что термическая проводимость контакта разнородных материалов повышается, если тепловой поток направлен из материала с большим термическим напряжением в материал с меньшим термическим напряжением [51]. В качестве теоретического критерия для определения направления теплового потока, соответствующего его максимальной величине, предлагается расстояние Λ между средними плоскостями контактирующих поверхностей [51, 60]:

$$\Lambda = (-1)^{i+1} \frac{r^2 \bar{q}}{2} \left(\frac{\alpha_1}{\lambda_1} - \frac{\alpha_2}{\lambda_2} \right),$$

где \bar{q} — средняя плотность теплового потока через контакт (с учётом знака), Вт м^{-2} ; r — радиус образца, м; i — идентификационный номер экспериментального образца. Если абсолютная величина Λ больше шероховатостей взаимодействующих поверхностей, то термическая контактная проводимость больше для теплового потока, направленного из материала с меньшим термическим напряжением. Если Λ меньше среднего порядка величины поверхностных шероховатостей, то максимум контактной проводимости наблюдается, когда тепло передается из материала с большим термическим напряжением [60].

С целью количественного описания влияния величины и направления теплового потока на контактное термическое сопротивление было получено точное решение задачи термоупругости для цилиндра, позволившее сделать вывод о том, что профиль поверхности торца цилиндра не зависит ни от теплоотдачи другого торца цилиндра, ни от профиля температуры охлаждаемого торца, полностью определяясь величиной и направлением теплового потока [18]. Если тепло входит в торец, то тепловой поток положителен, а торец принимает выпуклую форму. Если тепло истекает из торца, то тепловой поток отрицателен, а торец принимает вогнутую форму. При контактировании образцов из одинаковых материалов радиусы выпуклости и вогнутости

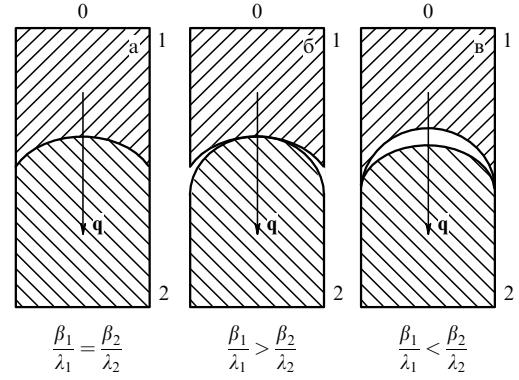


Рис. 12. Схемы профилей контактирующих торцов цилиндрических образцов при прохождении теплового потока.

взаимодействующих торцов совпадают и термическое сопротивление обусловлено только стягиванием теплового потока к пятнам микропятен слабо зависит от контактного давления, чистоты обработки поверхностей и рода материалов, то в случае теплового взаимодействия одинаковых материалов термическое сопротивление контакта практически не зависит от направления теплового потока. При контактировании образцов из различных материалов поверхность контакта зависит от соотношения радиусов кривизны соприкасающихся торцов. Создающаяся в результате термического расширения материала макроволнистость поверхности торцов может приводить к образованию контакта либо в пределах единичного микропятна, либо в пределах макропятна. Рассмотренные закономерности справедливы при выполнении условия [18]

$$\frac{\bar{q}}{P_n} \geq \frac{3\pi}{2} \frac{\lambda_2}{\beta_2 E r},$$

где \bar{q} — средняя плотность теплового потока через контакт, Вт м^{-2} ; P_n — давление сжатия, Па; λ_2 — теплопроводность материала, принимающего тепло, Вт $(\text{м К})^{-1}$; β_2 — коэффициент теплового расширения материала, принимающего тепло, К^{-1} ; E — приведённый модуль упругости, Па; r — радиус цилиндров, м. Если данное условие не выполняется, то размер макропятна совпадает с размерами торца и тепловая проводимость контакта (в вакууме) полностью определяется сопротивлением стягивания к микропятнам контакта.

5. Термический контакт в нестационарном режиме

Макростягивание линий теплового потока к области фактического контакта имеет место в непосредственной близости от средней плоскости контакта на расстоянии порядка [33]

$$\delta_{cn} \sim \left(\frac{A_n}{n_r} \right)^{1/2},$$

где A_n — номинальная площадь контакта, м^2 ; n_r — число пятен фактического контакта. Слой материала, ограниченный с одной стороны средней плоскостью контакта, а с другой — плоскостью, отстоящей от неё на расстояние

δ_{cn} , называется зоной возмущения. Более точные значения δ_{cn} могут быть найдены из (5) или (9), в зависимости от того, остаётся ли толщина возмущённой зоны постоянной или изменяется. В её пределах микростягивание выходит на стационарный режим в течение некоторого характерного промежутка времени, называемого временем релаксации:

$$\tau_1 = \frac{\Delta^2}{a_1} = \frac{A_a}{n_r a_1} \text{ для тела 1, } \tau_2 = \frac{\Delta^2}{a_2} = \frac{A_a}{n_r a_2} \text{ для тела 2,} \quad (19)$$

где a_1, a_2 — температуропроводности материалов 1 и 2, $\text{m}^2 \text{c}^{-1}$. Для переходных тепловых режимов, характерное время τ_c которых больше времени релаксации τ , справедливо соотношение (3), т.е. в каждый момент такие нестационарные процессы описываются классической теорией теплопроводности. Если характерное время нестационарного режима меньше времени микростягивания, то для моделирования таких процессов необходим дополнительный анализ, основанный на теории, учитывающей взаимодействия микрочастиц [44].

Тем не менее были предприняты попытки построения феноменологических моделей нестационарного реального контакта, позволяющие оценить влияние зоны возмущения на температурное поле и тепловой поток в режиме релаксации путём введения фиктивной теплопроводности и теплоёмкости зоны возмущения. Неоднородный слой реального контакта заменяется однородной стенкой с той же самой толщиной и идеальными контактами между твёрдыми телами, которая обладает внутренней энергией неоднородного слоя [61, 62]. Для того чтобы учсть неоднородность реального контакта, фиктивный слой делится на области с различной теплопроводностью (рис. 13): зона 3 моделирует теплопроводность через пятна фактического контакта, а зона 4 задаёт свойства среды в межконтактных зазорах. Термическая

проводимость эквивалентной стенки равна сумме параллельных проводимостей $\alpha_{\text{th}, 3, a}$ и $\alpha_{\text{th}, 4, a}$:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{th}, c, a} &= \alpha_{\text{th}, 3, a} + \alpha_{\text{th}, 4, a} \Leftrightarrow \frac{1}{R_{\text{th}, c, a}} = \frac{1}{R_{\text{th}, 3, a}} + \frac{1}{R_{\text{th}, 4, a}} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow R_{\text{th}, c} = \left(\frac{1}{R_{\text{th}, 3, a}} + \frac{1}{R_{\text{th}, 4, a}} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Для того чтобы ограничить задачу пределами одного измерения, вводятся гипотезы, касающиеся граничных условий и температурного поля [62]:

— в любой точке боковой поверхности области D тепловой поток равен нулю,

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0;$$

— все рассматриваемые среды находятся в идеальном контакте ($R_{\text{th}, i} \rightarrow 0$);

— распределение температуры равномерно на поверхностях P_1, P_2 ;

— термическая проводимость в области D предполагается линейной.

Окончательные выражения для теплоёмкости и объёмной теплопроводности эквивалентного слоя записываются в виде [62]:

$$\lambda' = \frac{\lambda_3 A_3 \partial \bar{T}_3(x, \tau) / \partial x + \lambda_4 A_4 \partial \bar{T}_4(x, \tau) / \partial x}{A_3 \partial \bar{T}_3(x, \tau) / \partial x + A_4 \partial \bar{T}_4(x, \tau) / \partial x}, \quad (20)$$

$$c' \rho' = \frac{c_3 \rho_3 A_3 \partial \bar{T}_3(x, \tau) / \partial \tau + c_4 \rho_4 A_4 \partial \bar{T}_4(x, \tau) / \partial \tau}{A_3 \partial \bar{T}_3(x, \tau) / \partial \tau + A_4 \partial \bar{T}_4(x, \tau) / \partial \tau}. \quad (21)$$

Таким образом, для того, чтобы рассчитать λ' и $c' \rho'$, необходимо определить температуры $\bar{T}_3(x, \tau)$, $\bar{T}_4(x, \tau)$, которые и находятся по этим параметрам, т.е. задача оказывается поставленной некорректно с точки зрения математической физики [63]. Тем не менее теплофизические свойства эквивалентной стенки могут быть найдены приближённо.

С этой целью вводится величина локального разделения теплового потока $\alpha(x, t)$, которая представляет собой отношение теплового потока $Q_3(x, t)$, проходящего через площадь A_3 , к полному тепловому потоку $Q(x, t)$, проходящему через сечение Σ :

$$\alpha(x, t) = \frac{Q_3(x, t)}{Q(x, t)}.$$

Тогда тепловой поток $Q_4(x, t)$ через сечение A_4 может быть найден как

$$Q_4(x, t) = Q(x, t) - Q_3(x, t) = [1 - \alpha(x, t)] Q(x, t),$$

а теплопроводность λ' согласно (20) будет равна

$$\begin{aligned} \lambda'(x, t) &= \frac{Q_3(x, t) + Q_4(x, t)}{Q_3(x, t)/\lambda_3 + Q_4(x, t)/\lambda_4} = \\ &= \frac{1}{\alpha(x, t)/\lambda_3 + (1 - \alpha(x, t))/\lambda_4}. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что в случаях, когда $\alpha(x, t)$ изменяется незначительно, для приближённого значения фиктивной теплопроводности можно допустить

$$\lambda'(x, t) \approx \lambda_a,$$

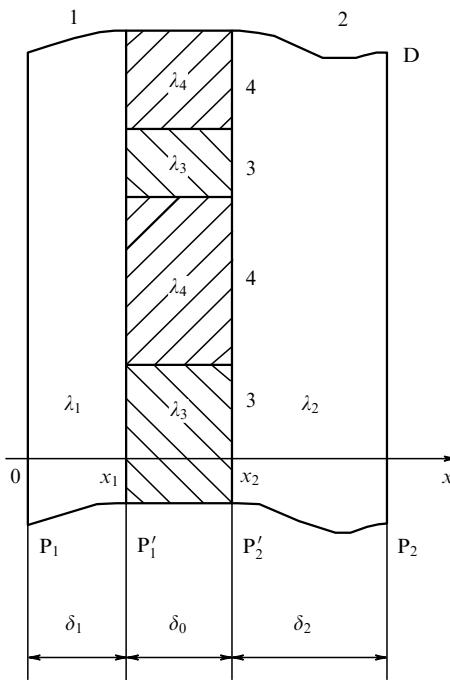


Рис. 13. Схема замены зоны возмущения реального контакта термически эквивалентным гетерогенным слоем.

где λ_a — средняя фиктивная теплопроводность неоднородного слоя, измеренная в стационарном режиме, $\text{Вт} (\text{м} \text{К})^{-1}$.

Для приближённого вычисления фиктивной объёмной теплоёмкости принимается, что скорости изменения средних температур $\bar{T}_3(x, \tau)$, $\bar{T}_4(x, \tau)$ близки между собой,

$$\frac{\partial \bar{T}_3(x, \tau)}{\partial \tau} \approx \frac{\partial \bar{T}_4(x, \tau)}{\partial \tau},$$

т.е. согласно (21)

$$c' \rho' \approx \frac{c_3 \rho_3 A_3 + c_4 \rho_4 A_4}{A_3 + A_4} = c_a \rho_a,$$

где $c_a \rho_a$ — фиктивная объёмная теплоёмкость неоднородного слоя в стационарном режиме, $\text{Дж} (\text{м}^3 \text{К})^{-1}$. Поскольку $c_a \rho_a$ и λ_a представляют собой постоянные величины, рассматриваемая модель неоднородного слоя является линейной.

В режиме релаксации, начиная с момента $\tau = 0$, температура в каждой точке M системы с координатой x_M может быть представлена в виде

$$T(x_M, \tau) = \sum_{j=1}^{\infty} Q_j(x_M) \exp(-m_j \tau) + F(x_M),$$

где $F(x_M)$ — распределение температуры в стационарном режиме, К ; m_j — коэффициенты ряда, независимые в каждой точке M , с^{-1} . До момента времени порядка $1/m_1 = 1/m$ изменение температуры корректно описывается первым членом этого ряда:

$$\bar{T}_k(x, \tau) = \bar{Q}_k(x) \exp(-m\tau) + \bar{F}_k(x), \quad k = 1, 2, 3, 4. \quad (22)$$

Теплопроводность и объёмная теплоёмкость эквивалентного слоя в режиме релаксации определяются путём подстановки температурного поля (22) в выражения (20), (21). В частном случае $\bar{F}_k = \text{const}$ эти теплофизические свойства не зависят от времени и температуры и являются непрерывными функциями пространственной координаты:

$$\lambda'(x, \tau) = \frac{\lambda_3 A_3 d\bar{Q}_3(x)/dx + \lambda_4 A_4 d\bar{Q}_4(x)/dx}{A_3 d\bar{Q}_3(x)/dx + A_4 d\bar{Q}_4(x)/dx} = \lambda'(x), \quad (23)$$

$$c' \rho'(x, \tau) = \frac{c_3 \rho_3 A_3 \bar{Q}_3(x) + c_4 \rho_4 A_4 \bar{Q}_4(x)}{A_3 \bar{Q}_3(x) + A_4 \bar{Q}_4(x)} = c' \rho'(x). \quad (24)$$

В общем случае $\bar{F}_k \neq \text{const}$ выражение (24) для объёмной теплоёмкости сохраняется, но упрощение (23) уже не годится для описания фиктивной теплопроводности, которая в режиме релаксации должна стремиться к своему асимптотическому пределу в стационарном режиме [62]:

$$\lambda'(x, \tau) = \frac{\lambda_3 A_3 d\bar{F}_3(x)/dx + \lambda_4 A_4 d\bar{F}_4(x)/dx}{A_3 d\bar{F}_3(x)/dx + A_4 d\bar{F}_4(x)/dx} \rightarrow \lambda'_\infty(x).$$

Таким образом, модель эквивалентной стенки применима только к описанию нестационарных процессов в зоне возмущения вблизи стационарного состояния, когда фиктивная теплопроводность близка к её значе-

нию в стационарном режиме. В нестационарных процессах с характерным временем, меньшим времени микростягивания, фиктивная теплопроводность не может быть рассчитана по данной методике и модель эквивалентной стенки неприменима.

В этом отношении интересен подход, основанный на рассмотрении методами необратимой термодинамики сред с внутренними параметрами состояния и сред скоростного типа, в котором вводится скорость распространения тепла [64]. Похожий параметр используется и в теории теплопроводности дискретной среды, рассматривающей теплопроводность как процесс распространения тепловых волн с определёнными значениями энергии и импульса [53, 65, 66].

6. Термическая проводимость наносистем

Развитие технологий производства наноматериалов и их широкое применение вызывают повышенный интерес к механизмам переноса тепла в структурах размером порядка нанометра. На основе таких структур развиваются многие направления современной техники: кремниевая электроника, изготовление углеродных нанотрубок, полупроводниковых квантовых решёток, полимерных нанокомпозитов, многослойных плёнок и покрытий и др. В одних устройствах (компьютерные процессоры, полупроводниковые лазеры) необходима наибольшая термическая проводимость, в других (тепловые диоды, термоэлектрические материалы) — наименьшая. Как показали эксперименты, близость контактных поверхностей и крайне малый объём интерфейса существенно изменяют теплопередачу, усложняя задачи термического регулирования [67]. Эти задачи решаются по-разному в зависимости от диэлектрических свойств материалов, применяемых в тех или иных устройствах и определяющих механизм тепловой проводимости: электронный (металлы), фононный (неметаллы) или смешанный (металлы, полупроводники). Особую трудность представляют собой интерфейсы, в которых происходит тепловое взаимодействие тел с разными диэлектрическими свойствами, например металла с диэлектриком или полупроводником. В таких случаях необходимо отдельное рассмотрение пространственно разделённых электронной и фононной проводимостей, а затем взаимодействия их носителей в контакте. В материалах со смешанной тепловой проводимостью электроны и фононы пространственно совмещены, что приводит к необходимости рассмотрения электрон-фононного взаимодействия в пределах одной среды.

Фононы, являющиеся основными носителями теплового потока в неметаллах, представляют собой "квазичастицы" упругих волн, распространяющиеся за счёт колебаний решётки. Фононы имеют большой диапазон частот и длины свободного пробега (до рассеяния). При комнатной температуре свободный пробег составляет 1–100 нм, т.е. имеет порядок размера структуры материала, а иногда и длины тепловой волны. Сегодня ни одна из аналитических теорий не описывает в полной мере волновую природу фононов. По этой причине расхождение между результатами теоретических расчётов и экспериментальными данными остаётся значительным. Кроме того, не решён ряд принципиальных вопросов, среди которых — проблема определения температуры в пределах длины свободного пробега фононов.

Помимо закона Фурье существует два основных подхода к теоретическому изучению фононной теплопроводности [67]:

- численное решение уравнения Больцмана;
- моделирование теплопроводности на атомном уровне.

Наибольшее число атомных моделей теплопроводности построено методами молекулярной динамики, основанными на уравнениях движения Ньютона и обычно на эмпирических выражениях для потенциала межатомного взаимодействия. Такой подход является классическим, что допускает его применение для изучения тепловых процессов в твёрдых телах при температурах, превышающих температуру Дебая. Этот подход также не учитывает электрон-фононные взаимодействия в металлах и полупроводниках. Тем не менее он вполне пригоден для моделирования непосредственно фононной теплопроводности. Из множества методов молекулярной динамики для этой цели чаще всего используются [67]:

- метод Грина – Кубо, в котором исследуются тепловые колебания решётки при наличии теплового потока;
- "прямой метод", воспроизводящий процесс приложения к системе температурного градиента (порядка 10^9 К м^{-1}) и определяющий теплопроводность по закону Фурье.

Оба метода позволяют рассчитать теплопроводность приблизительно с одинаковой точностью (около 20 %), однако прямой метод имеет дополнительное преимущество, связанное с возможностью вычисления контактного термического сопротивления для многослойных систем.

Численные модели теплообмена в контакте твёрдых тел показывают наличие собственного термического сопротивления даже для механически идеального интерфейса (в отсутствие стягивания) кристаллов, имеющих структуру алмаза и различающихся только атомной массой. Величина соответствующей термической проводимости составляет для разных граничных условий 0,8–0,9 ГВт $\text{м}^{-2} \text{К}^{-1}$, а для аналогичных кристаллов Si — 0,85–1,53 ГВт $\text{м}^{-2} \text{К}^{-1}$ (рис. 14). Эквивалентная толщина совершенного кристалла с тем же сопротивлением имеет величину порядка 100 нм [67].

В области интерфейса наблюдается резкое увеличение температурного градиента, связанное с рассеянием

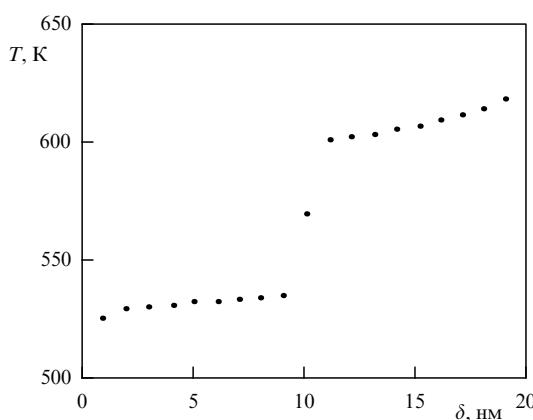


Рис. 14. Профиль температуры, рассчитанный для двухслойного кристалла Si (образец толщиной 25 нм содержит 840 атомов вдоль расчётной оси); время расчёта 1 нс.

фононов, проходящих через границу раздела двух кристаллов: фононы, отражённые от барьера, имеют энергию, отличную от энергии приходящих фононов, причём по мере приближения к границе раздела различие усиливается. Это приводит к возрастанию градиента средней энергии фононов, и, как следствие, к возрастанию градиента температуры вблизи интерфейса. Температура отражённых фононов называется граничной. Разность граничной температуры и результаты линейной экстраполяции распределения температуры внутри среды прямо пропорциональна отношению теплового потока к длине свободного пробега фононов и теплопроводности материала. Таким образом, данная величина определяет градиент температуры и термическую проводимость $\alpha_{\text{th},c}$ атомных слоёв, прилегающих к интерфейсу.

Точное выражение для расчёта $\alpha_{\text{th},c}$ предложено Янгом и Марисом [67]:

$$\alpha_{\text{th},c}(T) = \int C(\omega, T) \langle v(\omega) \rangle \langle t(\omega) \rangle d\omega,$$

где ω — частота тепловой волны, Гц; $C(\omega, T)$ — специфическая функция, характеризующая состояние фононов и определяемая из распределения Бозе–Эйнштейна, Дж с $\text{м}^{-3} \text{К}^{-1}$; $\langle v(\omega) \rangle$ — компонента фазовой скорости, нормальная к интерфейсу, м с^{-1} ; $\langle t(\omega) \rangle$ — коэффициент перехода; $\langle v(\omega) \rangle$ и $\langle t(\omega) \rangle$ усреднены по всему диапазону частот и всем волновым векторам, расположенным как перпендикулярно, так и под некоторым углом к границе. Янг и Марис установили, что $\langle t(\omega) \rangle$ монотонно уменьшается с возрастанием ω . Этот результат отличается от классического вывода о слабой зависимости коэффициента перехода от волновой частоты вплоть до её предельного значения, равного максимальной частоте более мягкого материала.

К классическим моделям, позволяющим определить коэффициент перехода, относятся:

— акустическая модель, согласно которой термическое сопротивление идеального контакта является следствием различия плотностей ρ и скоростей звука a взаимодействующих материалов α и β [67]:

$$\langle t_{z\beta} \rangle = \frac{4Z_z Z_\beta}{(Z_z + Z_\beta)^2},$$

где $Z = \rho a$ — акустический импеданс, кг (м с) $^{-1}$;

— диффузионная модель, предполагающая, что все фононы, сталкивающиеся в интерфейсе, "забывают" о своём движении до рассеяния, вероятность которого прямо пропорциональна плотности состояний фононов.

Как молекулярная динамика, так и квантовая механика используют термодинамическое определение температуры, т.е. предполагают, что данный параметр имеет смысл для макроскопических систем, отличительной особенностью которых является статистическая воспроизводимость связанных с ними событий и измерений. Кроме того, в квантовой механике вводится понятие ансамбля частиц, которые *независимо* друг от друга находятся в одинаковых макроскопических условиях. Результат измерения состояния квантового ансамбля аналогичен результату большого числа последовательных измерений состояний его элементов, т.е. ключевым в определении является не число элементов, а число опытов, которое может быть проведено с использованием

либо большого числа частиц за короткий промежуток времени, либо малого числа частиц в течение длительного времени [68].

Температура определяется как величина, связанная со средней кинетической энергией системы, полученной в результате N измерений [67]:

$$\langle \varepsilon_i \rangle = \frac{\mu}{2N} \sum_{i=1}^N v_i^2 = \left\langle \frac{1}{2} \mu v_i^2 \right\rangle, \quad (25)$$

где μ — атомная масса, кг. Характер взаимосвязи зависит от применяемого метода расчёта:

— в молекулярной динамике, основанной на механике Ньютона, используется классическое соотношение [67]

$$\left\langle \frac{1}{2} \mu v_i^2 \right\rangle = \langle \varepsilon_i \rangle = \frac{3}{2} k T_i;$$

— квантовая механика предполагает среднюю энергию возбуждения системы атомов равной энергии фона с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией γ для статистики Бозе–Эйнштейна [67]:

$$\left\langle \frac{1}{2} \mu v_i^2 \right\rangle = \frac{1}{4N} \sum_{\gamma, \mathbf{q}} \hbar \omega_\gamma(\mathbf{q}) \xi^{(i)2}(\gamma, \mathbf{q}) \times \times \left\{ \frac{2}{\exp[\hbar \omega_\lambda(\mathbf{q})/(k T_i)] - 1} + 1 \right\}, \quad (26)$$

где $\xi^{(i)2}$ — квадраты компонент вектора поляризации, нормированные так, что

$$\sum_{\gamma} \xi^{(i)2}(\gamma, \mathbf{q}) = 3.$$

Для высоких температур (приблизительно от 1000 К), при которых $kT \gg \hbar \omega_\gamma(\mathbf{q})$, состояние частиц Бозе аппроксимируется следующим уравнением [67]:

$$\frac{2}{\exp[\hbar \omega_\lambda(\mathbf{q})/(k T_i)] - 1} + 1 \approx 2 \frac{k T_i}{\hbar \omega_\lambda(\mathbf{q})}.$$

В этом случае (26) преобразуется в (25) и квантовая механика предсказывает тот же результат, что и молекулярная динамика. В диапазоне температур от 300 до 1000 К значения температуры, рассчитанные с помощью (25) и (26) сильно различаются. Поскольку в области низких температур более применима квантовая механика, в указанном диапазоне предпочтительнее уравнение (26).

Температура классической системы известна в каждой её точке, в то время как квантовое определение устанавливает минимальный размер системы, для которой можно рассчитать температуру, — среднюю длину свободного пробега фона. Для систем с разной температурой характерно различное распределение фона, которое может измениться в результате их рассеяния при взаимодействии систем: чаще всего один фонон делится на два или два фона преобразуются в один. Низкочастотные фоны имеют большую длину свободного пробега, высокочастотные — малую. Средняя длина свободного пробега называется границей Казимира. Как правило, граница Казимира больше размеров ячеек, моделируемых в молекулярной динамике.

Так как размеры наносистем соизмеримы с длиной свободного пробега фононов, возникает вопрос о возможности локального определения температуры в квантовой механике. Уравнение (26), связывающее температуру с энергией возбуждения и частотой фона, не допускает разрыва температуры между различными атомными слоями, что противоречит результатам, показанным на рис. 14. Данные результаты могут быть получены экспериментально при рассеянии рентгеновского излучения на соответствующих атомных решётках. Кроме того, если толщина атомного слоя меньше длины свободного пробега фона, то оказывается невозможным найти температуру в его пределах с использованием рассмотренного квантового определения. Формализм Ландауэра, предполагающий, что тепло передаётся от одного теплового резервуара к другому, также оказывается неэффективным, поскольку длина свободного пробега намного меньше расстояния между резервуарами [67].

Другой способ квантового определения температуры — связать температуру со средней частотой самих атомов [65, 69]. Для этого вводится понятие "квазичастицы", кинетическая и полная энергии которой равны средним значениям соответствующих энергий для данной системы атомов. Квазичастица рассматривается в координатной и импульсной системах отсчёта, начала которых совпадают с центрами распределения вероятностей данных величин ($\bar{x} = 0, \bar{p} = 0$). При таком выборе систем отсчёта средние значения квадратов координаты и импульса равны их средним квадратическим отклонениям $(\Delta x)^2$ и $(\Delta p)^2$ [66]:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2}, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \overline{(p - \bar{p})^2} = \overline{p^2}.$$

Тогда средняя кинетическая энергия \bar{e} оказывается равной неопределённости кинетической энергии (квадратному корню из среднего квадратического отклонения) [65]:

$$\bar{e} = \frac{\overline{(p)^2}}{2\mu} = \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2\mu} = \sqrt{\overline{(\Delta e)^2}} = |\Delta e|, \quad \text{т.е. } |\Delta e| = \frac{1}{2} k T, \quad (27)$$

где μ — масса частицы, T — термодинамическая температура, не зависящая от числа степеней свободы системы. Согласно (27) абсолютная температура не может быть равной нулю, так как в соответствии с соотношением неопределённостей Гейзенберга бесконечно малому значению неопределённости импульса соответствует бесконечно большая неопределённость координаты, не имеющая физического смысла [66]:

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta p)^2 (\Delta x)^2} &\geq \frac{\hbar^2}{4} \Leftrightarrow 2\mu |\Delta e| \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \mu k T \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \Leftrightarrow T \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4\mu k} \Leftrightarrow T \geq \frac{\hbar^2}{4\mu k} \frac{1}{(\Delta x)^2}, \end{aligned}$$

что соответствует третьему закону термодинамики.

Такой подход позволяет получить выражение для абсолютной температуры в виде [65, 66, 69]

$$T = f(E_0) = f(\hbar \omega_0), \quad (28)$$

где E_0 — полная энергия квазичастицы, характеризующей состояние гомогенной системы, состоящей из частиц "0", Дж; ω_0 — циклическая частота тепловых колебаний квазичастицы, Гц.

Температуры атомных слоев a и b в идеальном контакте будут одинаковы и равны некоторому значению T_{ab} только в случае термодинамического равновесия. Исходя из связи температуры с энергией частицы (28), можно утверждать, что в данном состоянии частицы a и b будут находиться на энергетическом уровне E_{ab} . Во всех других случаях E_{ab} представляет собой предел, к которому стремятся полные энергии частиц атомных слоёв в идеальном контакте (рис. 15). Частицы системы a , со стороны которой передаётся тепловой поток, будут находиться на более высоком энергетическом уровне относительно E_{ab} :

$$E_a = E_{ab} + \Delta E_a,$$

а частицы b — на более низком уровне:

$$E_b = E_{ab} - \Delta E_b.$$

Передача энергии от системы a к системе b соответствует переходу 1 частиц a и b на уровень E_{ab} .

С другой стороны, частицы a и b взаимодействуют с частицами своих систем. Поэтому они не останутся на уровне E_{ab} (переход 2): частица a перейдёт в более возбуждённое состояние E_a , b — в менее возбуждённое состояние E_b . В результате двойного перехода 1–2 произойдёт пространственное распространение тепловой энергии. Время двойного перехода равно удвоенному времени перехода в одном направлении Δt . Если частицы a и b идентичны (принадлежат одному и тому же индивидуальному веществу), то их энергии возбуждения равны,

$$\Delta E_a = \Delta E_b.$$

Поскольку периодические энергетические переходы частиц около равновесного состояния, приводящие к пространственному распространению энергии, не связаны с переносом вещества, то на атомном уровне теплопроводность представляет собой распространение тепловых волн [53].

Рассмотренная картина отражает механизм теплопроводности в веществе на квантовом уровне и разви-

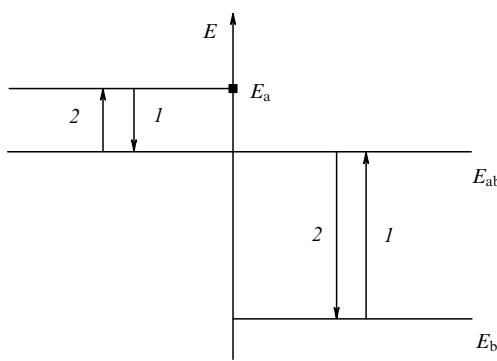


Рис. 15. Периодические энергетические переходы частиц атомных слоёв гомогенных систем a и b , находящихся в идеальном контакте.

вает гипотезу А.Ф. Иоффе, согласно которой в случае, когда длина свободного пробега фонондов равна или меньше постоянной решётки, тепло распространяется только в результате обмена энергией между соседними атомами [70].

Если средняя длина свободного пробега фонондов значительно больше размеров решётки, основным фактором, влияющим на теплопроводность, является рассеяние фонондов. А.Ф. Иоффе предположил, что основными источниками рассеяния фонондов в этом случае являются флуктуации плотности ангармоничности тепловых колебаний. Полученная им формула имеет следующий вид [70]:

$$\lambda_{ph} = \frac{v_{ph}}{3} \left[g_0 \left(T - \frac{\theta}{3} \right) \right]^{-1},$$

где λ_{ph} — фононная теплопроводность, Вт $(\text{м К})^{-1}$; g_0 — коэффициент ангармоничности, $\text{м}^2 \text{Дж}^{-1}$; v_{ph} — средняя скорость фонондов, м с^{-1} ; θ — температура Дебая, К. Температура Дебая соответствует состоянию твёрдого тела, в котором возбуждены все моды (степени свободы) колебаний решётки. Дальнейшее возрастание температуры не приводит к появлению новых мод, а ведёт к возрастанию средней энергии колебаний за счёт увеличения амплитуд уже существующих мод. Температура Дебая равна

$$\theta = \frac{\hbar \omega_{max}}{k},$$

где ω_{max} — максимальная циклическая частота колебаний атомов твёрдого тела, Гц. Значение g_0 находится опытным путём, однако возможно и его теоретическое определение исходя из того, что постоянная Грюнайзена, вычисляемая аналитически, определяется ангармонизмом и, по существу, является видоизменённым коэффициентом ангармоничности [70].

В металлах и кристаллических полупроводниках проявляется не только фононная теплопроводность, но и электронная, причём в металлах электронная теплопроводность преобладает. Кинетическая теория электронной теплопроводности основывается на гипотезе о существовании электронного газа, частицами которого являются электроны. По кинетической формуле Дебая теплопроводность газа [70]

$$\lambda = \frac{1}{3} c_v v l,$$

где c_v — объёмная теплоёмкость, Дж $\text{м}^{-3} \text{К}^{-1}$; v — средняя скорость частиц, м с^{-1} ; l — длина свободного пробега, м. Пренебрегая рядом факторов, в отсутствие электрического тока формулу Дебая с помощью уравнения Больцмана можно преобразовать в выражение, называемое законом Видемана – Франца [70]:

$$\lambda_e = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2 \sigma T, \quad (29)$$

где σ — удельная электропроводность, $\text{Ом}^{-1} \text{м}^{-1}$. Представленное в более общем виде это выражение называется законом Видемана – Франца – Лоренца [70]:

$$\lambda_e = L \sigma T, \quad (30)$$

где L — число Лоренца, Дж 2 Кл $^{-2}$ К $^{-2}$. Универсальность выражения (30) заключается в возможности выразить

неучтённые особенности поведения электрона с помощью различных значений L . Экспериментальные исследования позволили установить справедливость закона Видемана – Франца – Лоренца в виде (30) для всех металлов и в виде (29) для многих металлов. При этом для одних металлов отклонение от соотношения (29) наблюдается во всём диапазоне температуры, а для других — только при определённых значениях температуры. В ряде полупроводниковых материалов число Лоренца сильно зависит от межзонного рассеяния, что также требует применения специальных методов расчёта.

Кроме основных механизмов теплопроводности, к которым относятся электронная и фононная, существуют добавочные, образующие в совокупности с основными полную теплопроводность материала: биполярная диффузия, электромагнитное излучение, перенос теплоты высоковозбуждёнными носителями и спиновыми волнами. В контакте металлов и полупроводников также проявляется электрон-фононное взаимодействие.

В целом, для полной теплопроводности твёрдых тел справедливо правило аддитивности, которое подтверждается экспериментально [70]:

$$\lambda = \sum_i \lambda_i,$$

где λ_i — составляющие полной теплопроводности, $\text{Вт}(\text{м}\text{K})^{-1}$.

Таким образом, излучение тепловой проводимости наносистем является актуальным активно развивающимся научным направлением теории теплопроводности твёрдых тел, в котором пока ещё не решён целый ряд вопросов, а именно: о границах применимости термодинамической температуры, механизмах теплопроводности для структур с размерами меньшими средней длины свободного пробега фононов, контактной теплопроводности наносистем, термическом сопротивлении идеального контакта, переносе тепла через поверхностные наноплёнки и др. Решение данных вопросов неразрывно связано с методами теплофизики и физики твёрдого тела и является логическим продолжением этих теорий. Вместе с тем многие решения, полученные для твёрдых тел, оказываются недостаточно точными при рассмотрении процессов теплопроводности в наномасштабах, например закон Видемана – Франца – Лоренца, и требуют дополнительного анализа с привлечением современных подходов квантовой механики. Многие экспериментальные результаты, в частности существование термического сопротивления идеального контакта, которые нуждаются в теоретическом обосновании, открывают дополнительные возможности для внедрения в современные технологии производства наноматериалов и термического регулирования наносистем.

7. Теплоперенос в наноплёнках

Помимо случая естественного образования плёнок на поверхности металлов в воздухе, когда полупроводниковые и диэлектрические плёнки, влияющие на теплопроводность многослойных систем, являются чаще всего негативным фактором, который необходимо принимать во внимание [50], существуют возможности целенаправленного создания поверхностных наноплёнок, в первую очередь, для применения в микроэлектронике (кремни-

евые изоляторы, многослойные электронные устройства, полупроводниковые или диэлектрические мембранны) [67]. Во всех случаях тепловая проводимость плёнок должна быть определена и, если возможно, регулируема.

Плёнки, образующиеся в естественных условиях в результате адсорбции газа, относятся к адгезионным. Точно не установлено, существуют ли такие плёнки длительное время или они сразу превращаются в оксидные. Толщина адгезионного слоя несколько превышает толщину мономолекулярного слоя, составляя примерно 0,7 нм, причём адгезионная плёнка покрывает всю поверхность металла. Так называемые плёнки потускнения обычно представляют собой оксидные или сульфидные плёнки толщиной несколько нанометров. При комнатной температуре они нарастают медленно. С повышением температуры толщина плёнки и скорость её роста увеличиваются: при повышенных температурах ($T > 573$ К) рост плёнок подчиняется параболическому закону, при высоких ($T > 1073$ К) — линейному. При достижении некоторой толщины (6–10 нм при комнатной температуре) рост плёнки практически прекращается, поскольку она защищает материал от дальнейшего окисления. Толщина оксидных плёнок на благородных металлах очень мала. На золоте имеется практически только адгезионный слой кислорода. Как показывают экспериментальные данные, поверхностные плёнки на стали, алюминии, меди, серебре и золоте разрушаются достаточно легко [50].

Толщины искусственных плёнок, применяемых в микроэлектронике, достигают нескольких десятков или сотен нанометров. Основными факторами, влияющими на теплопроводность плёнок, являются толщина, однородность и структура материала, наличие примеси, температура. Наибольшая теплопроводность свойственна монокристаллам толщиной более 500 нм, значительно превышающей границу Казимира. Уменьшение толщины монокристалла приводит к уменьшению теплопроводности. При добавлении примесей кристаллическая структура нарушается, что также приводит к понижению теплопроводности.

Поликристаллические плёнки с той же толщиной имеют значительно меньшую теплопроводность. Причём при добавлении примесей теплопроводность поликристаллов может возрастать. Наиболее распространены плёнки из кремния (Si) и двуокиси кремния (SiO_2). Используются также GaAs, Ge и AlAs [70].

Принято считать, что из-за малой толщины плёнок их термическое сопротивление теплопроводности, равное отношению толщины плёнки δ_f к её теплопроводности λ_f ,

$$R_{\text{th},f} = \frac{\delta_f}{\lambda_f},$$

пренебрежимо мало, а влияние $R_{\text{th},f}$ незначительно по сравнению с влиянием термического сопротивления соприкасающихся материалов [47]. Тем не менее если принять во внимание уменьшение теплопроводности с уменьшением толщины наноплёнки, то до определённой границы, связанной с некоторым числом атомных слоёв, термическое сопротивление плёнки может оказывать влияние на полное термическое сопротивление системы. Кроме того, плёнка имеет, как минимум, одну границу с твёрдым телом, на которой происходит рассеяние фононов.

Электроны, переносящие тепло в металле или полупроводнике, вызывают колебания решётки, которые приводят к образованию преимущественно оптических фононов, преобразующихся в процессе перемещения в материале в высокочастотные акустические. При рассеянии продольных оптических фононов на границе появляется также поперечная составляющая, усложняющая характер рассеяния. Влияние границы материала на распространение фононов является одной из так называемых горячих точек, оказывающих решающее влияние на теплопроводность в наносистемах.

Пространственная область максимальной интенсивности образования оптических фононов прилегает к границе материала, от которой отводится тепло. Характерный размер r области, в которой образуется оптический фонон, сопоставим с размером решётки, что значительно меньше средней длины свободного пробега фонона ($l \approx 250$ нм). Это отличие является второй горячей точкой, приводящей к тому, что реальные температуры в прилегающей к границе зоне выше рассчитываемых по диффузионной теории, причём разность реальных и расчётных температур увеличивается прямо пропорционально значению l/r .

Третья горячая точка обусловлена тем, что групповая скорость образующихся оптических фононов значительно меньше характеристической скорости теплопроводности решётки, что приводит к увеличению концентрации оптических фононов в области их активного образования [67]. Поскольку концентрация оптических фононов возрастает вблизи "холодной" границы материала, появляется отрицательный поток фононов, ответственный за дополнительное термическое сопротивление вблизи границы.

Толщина наноплёнки может быть как больше, так и меньше средней длины свободного пробега фононов. По мере уменьшения толщины плёнки и её приближения к размерам решётки уменьшается избыточная температура на теплоотводящей границе, обусловленная влиянием второй и третьей горячих точек. Вместе с тем усиливается роль рассеяния на границе (первая горячая точка). В то время как продольная теплопроводность плёнки в направлении, перпендикулярном к границе, уменьшается, её составляющая вдоль границы может возрастать из-за появления поперечной компоненты волнового вектора фононов при рассеянии, достигая значений, превосходящих значения продольной составляющей.

Увеличение теплопроводности вдоль границы плёнки объясняется свойствами одномерных и двумерных наноструктур, для которых характерны особые поверхностные режимы распространения фононов. Экспериментальные исследования одномерных углеродных нанотрубок толщиной от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров показали, что такие системы имеют при комнатной температуре теплопроводность около $3000 \text{ Вт}(\text{м}\text{K})^{-1}$ и передают тепловой поток с минимальными потерями, подобно тому, как сверхпроводники передают электрический ток, а оптические волноводы — свет. С понижением температуры поверхностная теплопроводность уменьшается и при температурах, близких к абсолютному нулю, становится на несколько порядков меньшей ($0,1 - 1 \text{ Вт} (\text{м}\text{K})^{-1}$), чем при комнатной температуре. Квант тепловой проводимости фононов в одномерных наноструктурах может

быть рассчитан как (ср. (29)) [67]

$$\alpha_{\text{ph}, \min} = \frac{\pi^2 k^2 T}{3h} = \frac{\pi k^2 T}{6\hbar}. \quad (31)$$

Как видно из (31), $\alpha_{\text{ph}, \min}$ линейно возрастает с увеличением температуры.

В наноплёнках поверхностная теплопроводность двумерна, но принципы переноса тепла поверхностными фононами сохраняются, с чем и связано появление поперечной составляющей волнового вектора при рассеянии на границе.

Наноплёнки образуют подгруппу более общей группы структур, к которым относятся наноматериалы: аморфные или стеклообразные вещества, материалы с наноразмерными зёренами и нанопорами (пустотами размером порядка нескольких нанометров), многослойные плёнки, эпитаксиальные решётки. Отличительной чертой наноматериалов является возможность выделения элементарнойnanoструктуры, повторением которой можно получить необходимое количество данного материала. В аморфных материалах размер элементарной nanoструктуры близок к размеру решётки. Многослойные плёнки характеризуются периодом, определяемым толщиной элементарной структуры, которая может состоять из двух слоёв чередующихся материалов. Теплопроводность в наноматериалах отличается наличием коллективных мод, а также интерференции фононов.

Аморфные и пористые материалы имеют малую диэлектрическую проницаемость, для которой характерна низкая теплопроводность. Наноплёнки из таких материалов, которые широко используются в электронике, требуют интенсивного охлаждения. Например, современные электронные логические устройства состоят из нескольких слоёв металла (Cu), перемежающихся с диэлектрическими плёнками толщиной менее 500 нм (полиамида). По мере развития технологий число слоёв возрастает, а их толщина уменьшается. В связи с этим появился такой вид nanoструктур, как многослойные плёнки и сверхрешётки.

Многослойные nanoструктуры — это системы, которые содержат чередующиеся слои различных материалов толщиной от нескольких нанометров до нескольких сотен нанометров. В многослойных плёнках материалы — аморфные или поликристаллические, в сверхрешётках — монокристаллические. Многослойные наносистемы имеют два характерных случая тепловой проводимости, в которых средняя длина свободного пробега фононов меньше или больше периода, определяемого как толщина элементарной nanoструктуры, состоящей из двух или нескольких слоёв.

Эксперименты показывают, что в первом случае теплопроводность слабо зависит от толщины, т.е. фононы с близкой к толщине плёнки средней длиной свободного пробега слабо влияют на теплоперенос.

Термическое сопротивление многослойной системы рассчитывается как сумма сопротивлений плёнок и интерфейсов. Если плёнки являются аморфными, то термические сопротивления интерфейсов, чаще всего, малы по сравнению с сопротивлением слоёв. В таких случаях термическая проводимость многослойной плёнки практически не зависит от периода. Слабое влияние сопротивлений интерфейсов было экспериментально установлено для таких контактных пар, как $\text{Y}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$, $\text{ZrO}_2 - \text{Y}_2\text{O}_3$ [67].

Для тепловой проводимости сверхрешёток, как правило, характерен второй режим. Если средняя длина свободного пробега превышает период более чем в 10 раз, то возможна интерференция волн, отражённых от разных интерфейсов, приводящая к разрывам частотных распределений фононов, что обусловлено:

- значительным уменьшением групповых скоростей фононов, в первую очередь, акустических, которые имеют высокие энергии;

- увеличением числа процессов рассеяния и переброса.

Если средняя длина свободного пробега фононов не достаточно велика для разрыва распределения частот, то решающее влияние на формирование термического сопротивления сверхрешётки оказывают эффекты единичного интерфейса, обусловленные:

- различием соотношений рассеяния в контактных материалах;

- дефектами и дислокациями в материалах с различными постоянными решётками;

- поверхностной шероховатостью;

- диффузией и сплавлением материалов.

Помимо этого на термическое сопротивление многослойной системы оказывают влияние период решётки и температурная зависимость теплопроводности материалов. Эксперименты со сверхрешётками, основанными на контактной паре Si–Ge, показали, что при толщине слоя, значительно меньшей критической, теплопроводность материала уменьшается с уменьшением толщины. Увеличение периода решётки приводит, как правило, к возрастанию теплопроводности. Это справедливо до тех пор, пока толщина плёнки не превысит порогового значения, при котором начинают заметно проявляться поверхностные дефекты, в результате чего возможно уменьшение теплопроводности. Если период решётки больше критической толщины, равной средней длине свободного пробега фононов, то его дальнейшее увеличение не приводит к возрастанию теплопроводности и термическая проводимость решётки зависит главным образом от сопротивлений интерфейсов и их числа.

Поверхностная шероховатость слоёв в сверхрешётках обычно невелика. Однако влияние поверхностных свойств усиливается в результате физических и химических процессов при выращивании одного материала на поверхности другого. Также возможна асимметрия формирования интерфейса, обусловленная различием остаточных явлений при выращивании материала *A* на поверхности *B* и материала *B* на поверхности *A*.

С возрастанием плотности интерфейсов (количество контактов, приходящихся на толщину решётки) теплопроводность решётки из материалов *A*–*B* приближается к теплопроводности соответствующего сплава *AB*. При этом теплопроводность решётки может быть как больше, так и меньше теплопроводности сплава. Предположительно определяющим фактором в этом случае является различие акустических импедансов материалов *A* и *B*: чем больше разница импедансов, тем меньше теплопроводность решётки. Возможно также проявление фактора направленности теплового потока.

Основными подходами к теоретическому описанию термической проводимости в сверхрешётках являются [67]:

- рассмотрение фононов как тепловых волн;
- применение уравнения Больцмана для представления фононов в виде частиц, переносящих элементарные тепловые возмущения;
- численное моделирование, основанное на молекуларной динамике.

Теория многослойных плёнок не закончена. Многие теоретические предпосылки не подтверждены экспериментально, а большое количество экспериментального материала пока не нашло теоретического обоснования. Например, до сих пор нет опытных данных, достоверно подтверждающих предсказываемое теорией существование разрыва частотных распределений фононов. С другой стороны, отсутствуют теоретические модели, позволяющие рассчитывать влияние плотности интерфейсов на теплопроводность решёток, которая может быть как больше, так и меньше теплопроводности соответствующего сплава. Целью таких моделей должна стать возможность описания свойств решёток из сплавов с различными акустическими импедансами, также недостаточно исследованных экспериментально.

Тем не менее существующие данные по теплопроводности в наноплёнках позволяют сделать следующие выводы [67]:

- термическое сопротивление интерфейсов существенно проявляется при отношении акустических импедансов контактной пары решётки, превышающем 1,1;

- различие акустических импедансов приводит к увеличению коэффициента отражения некогерентных фононов и появлению разрыва частотного спектра когерентных фононов, групповая скорость которых уменьшается;

- фононы, принадлежащие разным частям частного спектра, рассеиваются по-разному: распространение высокочастотных фононов с длинами волн около нескольких атомных слоёв блокируется рассеянием, характерным для сплавов; распространение низкочастотных фононов с большими длинами волн блокируется рассеянием, характерным для многослойных плёнок;

- термическое сопротивление интерфейсов зависит от поверхностной шероховатости, диффузии, остаточных свойств физических и химических превращений при выращивании одного материала на поверхности другого, направления теплового потока и температуры;

- фононная теплопроводность сверхрешётки может быть как больше, так и меньше теплопроводности соответствующего сплава и стремится к ней по мере увеличения плотности интерфейсов.

При распространении теплового потока параллельно интерфейсам теоретически ожидается увеличение теплопроводности по сравнению с теплопроводностью сплава благодаря образованию поверхностных мод. В то же время ряд измерений этой составляющей в сверхрешётках GaAs–AlAs показал уменьшение теплопроводности относительно её значений для материалов контактных пар приблизительно в четыре раза.

Наименьшее число теоретических работ посвящено рассмотрению теплопроводности наноплёнок как результата электрон-фононного взаимодействия. Проведённые исследования, использующие концепцию локальной температуры, показывают большой разброс результатов в зависимости от условий на границах материалов.

8. Заключение

С точки зрения необратимой термодинамики сопротивление R представляет собой параметр, который определяется отношением разности потенциалов $\Delta\varphi_X$ физической величины X к потоку Φ_X данной величины:

$$R = \frac{\Delta\varphi_X}{\Phi_X}.$$

В случае термического сопротивления потенциалом теплового потока является температура, а разность температур ΔT в числите соответствует тепловому потоку Q в знаменателе (абсолютное термическое сопротивление (2)). Если вместо теплового потока используется его плотность q , то термическое сопротивление является удельным (1) и характеризует тепловые свойства единицы площади сечения или поверхности материала. Поскольку удельное термическое сопротивление не связано с количественными характеристиками вещества, оно является термодинамически интенсивной величиной, зависящей только от свойств материалов. Абсолютное термическое сопротивление, напротив, зависит от площади и представляет собой термодинамически экстенсивную величину.

При рассмотрении контактных явлений для определения термического сопротивления используется разность потенциалов на взаимодействующих поверхностях материалов и поток, проходящий через зону контакта. Контактное термическое сопротивление представляет собой переменную величину, зависящую от множества факторов. Это приводит к нелинейности тепловых процессов в зоне контакта и невозможности связи потоков и потенциалов через постоянные коэффициенты. Данная проблема имеет два пути решения:

— представление контактного сопротивления в виде функции параметров, которые оказывают на него влияние:

$$R = f(x_1, x_2, \dots, x_n);$$

— отказ от использования понятия "контактное сопротивление" и установление прямой взаимосвязи между потоком и потенциалом физической величины в виде

$$\Phi_X = f(\Delta\varphi_X),$$

как, например, в диодной теории для получения соотношений типа

$$j = f(U).$$

Для реальных соединений преимущественно применяется первый способ.

Теория теплового контакта очень похожа на теорию Хольма, выделяющую основные компоненты электрического контактного сопротивления и описывающую их влияние на эмиссию и туннелирование электронов через область контакта. Контактное термическое сопротивление также делится на составляющие, которые имеют аналоги в электрическом сопротивлении. С этого момента в данных теориях начинается различие: если вследствие очевидной дискретности носителей электри-

ческого тока компоненты контактного электрического сопротивления анализируются с помощью квантовой механики, то для расчёта составляющих контактного термического сопротивления используются методы непрерывной среды, что приводит к необходимости введения фиктивной теплопроводности и эмпирических коэффициентов.

Термодинамическая интерпретация термического сопротивления позволяет определить его предельные значения применительно к контакту. Удельное контактное сопротивление является интенсивной величиной, характеризующей индивидуальные свойства материала. По этой причине удельное сопротивление стягивания удобно находить как сопротивление теплопроводности плоской стенки, термически эквивалентной возмущённой зоне. Площадь стенки считается равной фактической площади контакта. Поскольку удельное сопротивление стенки не зависит от её площади, это подтверждает интенсивность свойств удельного сопротивления стягивания, которое одинаково как для единичного микроконтакта, так и для макроконтакта в целом. Адиабатно изолированный материал, для которого фактическая площадь контакта равна нулю, не имеет никакого дополнительного термического сопротивления, кроме собственного сопротивления теплопроводности. Отсюда следует, что при нулевой фактической контактной площади удельное сопротивление стягивания, последовательно включаемое в термическую схему соединения вместе с сопротивлениями теплопроводности материалов, равно нулю. Так как по мере приближения фактической контактной площади к номинальной удельное сопротивление стягивания также стремится к нулю, оно имеет максимум при соотношении фактической и номинальной площадей, равном 0,201. Полное сопротивление стягивания зависит от площади соединения, т.е. является термодинамически экстенсивной величиной, и имеет следующие пределы: нуль при относительной фактической площади, равной единице, и бесконечность при относительной фактической площади, равной нулю. В системе с границами удельного сопротивления стягивания эти значения соответствуют пределам выражений (4), (5).

В теории теплопроводности пока окончательно не решены следующие задачи:

— расчёт термического сопротивления тесного контакта, которое согласно экспериментальным данным [37] имеет конечное значение, что противоречит граничному условию четвёртого рода;

— экспериментальное обоснование существования экстремума толщины возмущённой зоны и предела контактного термического сопротивления в области малых контактных давлений;

— применение в нестационарных процессах с характерным временем, меньшим времени микростягивания, эквивалентных моделей зоны возмущения, основанных на фиктивных параметрах теплопроводности и теплоёмкости;

— расчёт термического сопротивления контакта с учётом электронной и лучистой составляющей.

Значительное место в современной технике занимают устройства и материалы сnanoструктурой. Как показывают эксперименты, теплофизические процессы в масштабах порядка нанометра существенно отличаются от аналогичных процессов в макро- и микроструктурах.

Применение современных методов молекулярной динамики и квантовой механики для расчёта тепловых процессов в наносистемах позволило смоделировать экспериментально наблюдаемое возрастание температурного градиента в идеальных контактах кристаллов, а также рассчитать связанное с ним термическое сопротивление. Кроме того, сделаны новые выводы относительно зависимости коэффициента перехода идеального контакта от частоты фононов. Экспериментальные результаты и математические модели для их описания нуждаются в современных физических интерпретациях. Для построения таких интерпретаций необходимо решение принципиальных вопросов, среди которых — определение температуры для систем с размерами, меньшими границы Казимира, и объяснение механизмов переноса тепла в случаях, когда длина свободного пробега фононов меньше постоянной решётки. Также недостаточно изучено тепловое взаимодействие материалов с различными диэлектрическими свойствами, в частности распространение теплового потока в контактах металлов и полупроводников, металлов и диэлектриков, где электронная теплопроводность преобразуется в фононную или делится на несколько составляющих.

Исследование этих вопросов ограничено возможностями тепловых приборов, в частности недостаточной точностью и большой постоянной времени датчиков теплового потока, в то время как его величина необходима для расчёта контактного термического сопротивления. С этой точки зрения, эффективным средством исследования проблем контактного теплообмена могут стать недавно разработанные градиентные датчики теплового потока на основе висмута с постоянной времени $\sim 10^{-8} - 10^{-9}$ с и относительной погрешностью 2–3 %, использующие поперечный эффект Зеебека [71]. Возможность прямой градуировки термо-Э.Д.С. к плотности теплового потока была показана и для контакта Al–Si в области низких температур [30, 72, 73]. Так как сегодня лишь немногие типы датчиков позволяют проводить достоверные измерения теплового потока при криогенных температурах, исследование постоянной времени и точности датчиков на основе контактов металл–полупроводник весьма перспективно.

Список литературы

1. Мальков В А, Фаворский О Н, Леонтьев В Н *Контактный теплообмен в газотурбинных двигателях и энергоустановках* (М.: Машиностроение, 1978)
2. Попов В М *Теплообмен в зоне контакта разъемных и неразъемных соединений* (М.: Энергия, 1971)
3. Попов В М *Теплообмен через соединения на kleях* (М.: Энергия, 1974)
4. Шлыков Ю П, Ганин Е А, Царевский С Н *Контактное термическое сопротивление* (М.: Энергия, 1977)
5. Харитонов В В *Теплофизический расчет лазерных зеркал* 2-е изд. (М.: МИФИ, 1986)
6. Авдуевский В С и др. *Основы теплопередачи в авиационной и ракетно-космической технике* (Под общ. ред. В С Авдуевского, В К Кошкина) 2-е изд. (М.: Машиностроение, 1992) с. 4–6, 21–25, 28–34, 164–165, 319–327
7. Мадхусудана К В, Флетчер Л С *Аэрокосмическая техника* (3) 103 (1987)
8. Меснянкин С Ю, в сб. *Труды V Минского междунар. форума по тепломассообмену* (Минск: Изд-во ИТМО, 2004)
9. Меснянкин С Ю, Мясников С С, в сб. *Труды XV Школьно-семинара молодых ученых и специалистов "Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках"* Т. 2 (М.: МЭИ, 2005) с. 308
10. Grujicic M, Zhao C L, Dusel E C *Appl. Surf. Sci.* **246** 290 (2005)
11. Holm R *Electrical Contacts Handbook* (Berlin: Springer-Verlag, 1958)
12. Ганин Е А, в сб. *Теплотехнические проблемы энергосберегающей технологии в текстильной и легкой промышленности* (Под ред. А С Охотина и др.) (М.: МТИ, 1989) с. 6
13. Дульней Г Н и др. *Инж.-физ. журн.* **38** 441 (1980) [Dul'nev G N et al. *J. Eng. Phys. Thermophys.* **38** 255 (1980)]
14. Bahrami M et al., AIAA Technical Paper AIAA-2003-4197 (2003)
15. Barry G W, Goodling J S J. *Heat Transfer* **109** 820 (1987)
16. Бурдо О Г, Вискалова И М, Соколовская П Б *Изв. вузов. Приборостроение* **20** 86 (1989)
17. Muzychka Y S et al. *J. Thermophys. Heat Transfer* **13** 489 (1999)
18. Харитонов В В, Якутин Н В *ЖТФ* **67** (2) 1 (1997) [Kharitonov V V, Yakutin N V *Tech. Phys.* **42** 125 (1997)]
19. Бараповский Э Ф, Севастьянов П В *Вест. АН БССР. Сер. физ.-техн. наук* (1) 59 (1983)
20. Пономарев Б П, в сб. *Полупроводниковые приборы и преобразовательные устройства: Проектирование, расчет, моделирование и контроль* (Отв. ред. И Г Учайкин) (Саранск: Мордовский университет, 1986) с. 4
21. Алифанов О М, Артухин Е А, Румянцев С В *Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложения к обратным задачам теплообмена* (М.: Наука, 1988) с. 5 [Alifanov O M, Artyukhin E A, Rumyantsev S V *Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems with Applications to Universe Heat Transfer Problems* (New York: Begell House, 1995)]
22. Кошкин В К и др., в сб. *Научные труды МАИ* (М.: МАИ, 1981) с. 68
23. Попов В М *Инж.-физ. журн.* **27** 811 (1974) [Popov V M *J. Eng. Phys. Thermophys.* **27** 1339 (1974)]
24. Martin K A, Yovanovich M M, Chow Y L, AIAA Technical Paper AIAA-1984-1745 (1984)
25. Kennedy F E, Cullen S C, Leroy J M *J. Tribol.* **111** 63 (1988)
26. Kuhlmann-Wiedorf D *J. Tribol.* **109** 321 (1987)
27. Xu J, Fisher T S, in *The Ninth Intersociety Conf. on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems, 2004, ITERM Vol. 2* (Washington, DC: IEEE, 2004) p. 549
28. Fletcher L S *J. Heat Transfer* **110** 1059 (1988)
29. Phoderick E H *Metal-Semiconductor Contacts* (Oxford: Clarendon Press, 1978) [Родерик Э Х *Контакты металл–полупроводник* (М.: Радио и связь, 1982) с. 33–37, 53–57]
30. Викулов Д Г, Меснянкин С Ю, в сб. *Труды IV Российской национальной конф. по теплообмену* Т. 8 (М.: МЭИ, 2006) с. 43
31. Eid J C, Antonetti V W, in *Proc. of the 8th Intern. Heat Transfer Conf. Vol. 2* (San Francisco, Calif., 1986) p. 659
32. Меснянкин С Ю, в сб. *Труды II Российской национальной конф. по теплообмену* Т. 7 (М.: МЭИ, 1998) с. 165
33. Blondel C et al. *Cryogenics* **29** 569 (1989)
34. Попов В М, Новиков А П, Швырев А Н, в сб. *Труды Четвертой Российской национальной конф. по теплообмену* Т. 7 (М.: МЭИ, 2006) с. 312
35. Меснянкин С Ю, в сб. *Тепловое проектирование систем* (Под ред. Б М Панкратова) (М.: Изд-во МАИ, 1990) с. 78
36. Меснянкин С Ю, в сб. *Труды IV Минского международного форума по тепломассообмену* Т. 3 (Минск, 2000) с. 363
37. Коршунов И Г, Черанев В И, Тарасов Б Н *Бутлеровские сообщения* (10) 275 (2002)
38. Thomas T R, Probert S D *Int. J. Heat Mass Transfer* **13** 789 (1970)
39. Викулов А Г, Меснянкин С Ю, в сб. *Труды XI Туполевских чтений* Т. 1 (Казань: КГТУ, 2003) с. 121
40. Degiovanni A, Remy B, Andre S *J. Heat Tranfer J. Thermal. Sci.* **11** 359 (2002)
41. Mikic B, Carnasciali G *J. Heat Transfer* **92** 475 (1970)
42. Madhusudana C V, in *Proc. of the 8th Intern. Heat Transfer Conf.* (San Francisco, Calif., 1986) p. 651
43. Negus K J, Yovanovich M M, Thompson J C, AIAA Paper ATAA-1985-1014 (1985)
44. Измайлова В В, в сб. *Механика и физика контактного взаимодействия* (Отв. ред. Н Б Демкин) (Калинин: Калининский ун-т, 1985) с. 82
45. Cassagne B, Bardon J P, Beck J V, in *Proc. of the 8th Intern. Heat Transfer Conf. Vol. 2* (San Francisco, Calif., 1986) p. 483

46. Кокорев Л С и др., в сб. *Вопросы теплофизики ядерных реакторов* (М.: Атомиздат, 1977) с. 24
47. Phelan P E, Ito K, Hijikata K, Ohmon T, in *3d World Conf. on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, 1993* (1993) p. 1688
48. Bahrami M, Culham J R, Yovanovich M M *J. Heat Transfer* **126** 896 (2004)
49. Bahrami M, Culham J R, Yovanovich M M *J. Thermophys. Heat Transfer* **18** 218 (2004)
50. Викулов А Г *Вестн. МАИ* **14** (2) 47 (2007)
51. Somers R R (II), Miller J W, Fletcher L S, AIAA Paper AIAA-1978-873 (1978)
52. Новиков В С, в сб. *Теплофизика и теплотехника* Вып. 18 (Киев: Изд-во АН УССР, 1969) с. 126
53. Викулов А Г, Меснянкин С Ю, в сб. *Труды IV Российской национальной конф. по теплообмену* Т. 7 (М.: МЭИ, 2006) с. 179
54. Викулов Д Г, Викулов А Г, Меснянкин С Ю, в сб. *Труды VI междунар. конф. "Авиация и космонавтика — 2007"* (М.: МАИ, 2007) с. 99
55. Cooper M G, Mikic B B, Yovanovich M M *Int. J. Heat Mass Transfer* **12** 279 (1969)
56. Gogol W *Archivum termodyn.* **7** 289 (1986)
57. Moon J S, Keeler R N *Int. J. Heat Mass Transfer* **5** 967 (1962)
58. Clauzing A M *Int. J. Heat Mass Transfer* **9** 791 (1966)
59. Patel J D, M. S. Thesis (Miami: Univ. of Miami, 1968)
60. Veziroglu T N, Chandra S, paper presented at the *Fourth Intern. Heat Transfer Conf., Paris, 1970*
61. Cames-Pintaux A-M *Rev. Gén. Therm.* **252** 963 (1982)
62. Padet J-P, Cames-Pintaux A-M *Rev. Phys. Appl.* **20** 599 (1985)
63. Владимиров В С, Жаринов В В *Уравнения математической физики* (М.: Физматлит, 2000) с. 61
64. Чалая И Ю, в сб. *Труды XVI Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А. И. Леонтьева "Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках"* Т. 2 (М.: МЭИ, 2007) с. 193
65. Викулов А Г, в сб. *Труды XVI Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А.И. Леонтьева "Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках"* Т. 2 (М.: МЭИ, 2007) с. 231
66. Викулов Д Г, Викулов А Г, в сб. *Труды V Курчатовской молодежной научной школы* (М.: РНЦ "Курчатовский институт", 2007) с. 99
67. Cahill D G et al. *J. Appl. Phys.* **93** 793 (2003)
68. Блохинцев Д И *Основы квантовой механики* (М.: Наука, 1976) с. 59
69. Vikulov A G *Heat Transfer Res.* **39** 671 (2008)
70. Охотин А С, Боровикова Р П, Нечаева Т В *Теплопроводность твердых тел: Справочник* (Под ред. А С Охотина) (М.: Энергоатомиздат, 1964) с. 5
71. Сапожников С З, Митяков В Ю, Митяков А В *Градиентные датчики теплового потока в теплотехническом эксперименте* (Спб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2007) с. 16, 40, 50, 110, 136
72. Викулов Д Г, Меснянкин С Ю, в сб. *Труды IX Международной молодежной научно-практической конф. "Человек и космос"* (Днепропетровск, 2007) с. 192
73. Викулов Д Г, Викулов А Г, Меснянкин С Ю "Датчик теплового потока", Патент РФ № 66039 с приоритетом от 17 апреля 2007 г.

Solid-solid thermal contact problems: current understanding

S.Yu. Mesnyankin, A.G. Vikulov, D.G. Vikulov

*Moscow Aviation Institute (State University of Aerospace Technologies),
Volokolamskoe shosse 4, 125993 GSP-31, Moscow, Russian Federation
Tel. (7-499) 158-4981, (7-499) 158-43 14
Fax (7-499) 158-27 31
E-mail: viarticle@yandex.ru*

The past 40 years of theoretical and experimental research on contact heat transfer are reviewed. Thermophysical and mechanical processes involved in heat propagation through various kinds of solid-solid junctions are considered. Analytical and semiempirical expressions are presented which simulate these processes both under vacuum conditions and in the presence of a heat conducting medium in gaps. Reasons for the experimentally observed heat flux rectification are explained. Studies on the thermal contact under non-stationary regime are covered, as is the possibility of applying classical heat conduction theory to the thermal contact. A thermodynamic interpretation of the thermal contact resistance is suggested and basic approaches to the study of contact phenomena are described. The heat conduction of nanosystems is briefly reviewed. Theoretical problems yet to be solved are pointed out and possible solution methods suggested.

PACS numbers: **44.10+i**, 66.70.Df, 72.15.Eb

DOI: 10.3367/UFNr.0179.200909c.0945

Bibliography — 73 references

Received 2 December 2008, revised 15 April 2009

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **179** (9) 945–970 (2009)

Physics – Uspekhi **52** (9) (2009)