



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

**Θέμα:**

**ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΟΥ ΠΑΧΟΥΣ ΤΗΣ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΜΕΤΑΞΥ  
ΜΗΤΡΑΣ ΚΑΙ ΦΥΛΛΙΔΙΩΝ ΣΤΗ ΘΕΡΜΙΚΗ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑ ΤΩΝ  
ΣΥΝΘΕΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΥΛΙΚΩΝ**

υπό

**ΚΥΡΙΑΚΗ ΓΕΩΡΓΙΟΥ**

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των απαιτήσεων για την απόκτηση του  
Τίτλου Μεταπτυχιακών Σπουδών Ανάλυση και Διαχείριση Ενεργειακών  
Συστημάτων  
Βόλος, 2025

© 2025 Κυριάκης Γεώργιος

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ. 202 παρ. 2).

## **Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:**

|                                 |                                                                                                           |
|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Πρώτος Εξεταστής<br>(Επιβλέπων) | Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου<br>Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,<br>Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας           |
| Δεύτερος Εξεταστής              | Δρ. Γεώργιος Χαραλάμπους<br>Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων<br>Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας |
| Τρίτος Εξεταστής                | Δρ. Κωνσταντίνος Ρήτος<br>Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,<br>Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας     |

Ημερομηνία Εξέτασης : 24 Σεπτεμβρίου 2025

## Ευχαριστίες

Με την περάτωση της παρούσας εργασίας, θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου στον επιβλέποντα της μεταπτυχιακής εργασίας, Καθηγητή Δρ. Αθανάσιο Παπαθανασίου, για την υπόδειξη του θέματος καθώς και για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγησή που μου παρείχε κατά τη διάρκεια της υλοποίησης της εργασίας.

Ευχαριστώ επίσης, τα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής μου εργασίας, Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Χαραλάμπους Γεώργιο και Επίκουρο Καθηγητή κ. Ρήτο Κωνσταντίνο, για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μου και τις πολύτιμες υποδείξεις τους.

Ευχαριστώ ιδιαίτερα, τον διδάκτορα του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών, κ. Ανδρέα Τσιαντή για τη βοήθεια και τις συμβουλές που μου παρείχε κατά τη διεξαγωγή των προσομοιώσεων καθώς και για τις υποδείξεις του για τη σωστή χρήση του cluster στο Εργαστήριο Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας και του λογισμικού που χρησιμοποιήθηκε για την παρούσα εργασία.

Τέλος, δε θα μπορούσα να μην ευχαριστήσω ιδιαίτερα την οικογένεια και τους φίλους μου για την υπομονή και κατανόηση τους καθ' όλο το χρονικό διάστημα που απαιτήθηκε για την ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας.

*Αφιερωμένη στην οικογένειά μου,*

## ΘΕΜΑ

Μελέτη της επίδρασης της διεπιφάνειας μεταξύ μήτρας και φυλλιδίων στη θερμική αγωγιμότητα των σύνθετων πολυμερών υλικών

ΚΥΡΙΑΚΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2025

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου,  
Καθηγητής Ρεολογίας και Διεργασιών Πολυμερών

## Περίληψη

Η ανάγκη για δημιουργία νέων πολυμερικών προϊόντων με συνεχώς καλύτερες θερμικές, μηχανικές και οπτικές ιδιότητες με χαμηλό κόστος κατασκευής, μεγάλη διάρκεια ζωής και φιλικό προς το περιβάλλον έχει αποτελέσει το εφελτήριο για την συνεχή έρευνα και εξέλιξη πάνω σε αυτό τον τομέα. Η εξέλιξη των σύνθετων πολυμερικών υλικών απαιτεί τη συσχέτιση της μικροδομής του υλικού, όπως είναι η χημική σύσταση, η μοριακή αρχιτεκτονική και η μορφολογία του υλικού, με τις φυσικές του ιδιότητες.

Στην παρούσα διπλωματική εργασίας μελετάτε η θερμική αγωγιμότητα των σύνθετων πολυμερικών υλικών τα οποία είναι ενισχυμένα με φυλλίδια με ιδιαίτερη έμφαση στη μελέτη του πάχους της διεπιφάνειας μεταξύ μητρικού υλικού και πληρωτικού υλικού. Η διεπιφάνεια αυτή αποτελεί κρίσιμο παράγοντα στη μεταφορά θερμότητας εντός του σύνθετου υλικού καθώς διαφοροποιείται η θερμική αντίσταση του σε αυτή την περιοχή.

Αρχικά, χρειάστηκε να κάνουμε μια εκτεταμένη βιβλιογραφική ανασκόπηση πάνω σε έρευνες που έχουν γίνει για τη διεπιφάνεια καθώς είναι ένας τομέας ο οποίος εξελίσσεται ραγδαία. Η διεπιφάνεια δεν είναι μια σαφώς ορισμένη γραμμή, αλλά μια ζώνη με πάχος που εξαρτάται από τη φύση των υλικών, τις διαδικασίες παρασκευής και τις συνθήκες λειτουργίας. Επηρεάζει έντονα την θερμική συμπεριφορά του σύνθετου υλικού μέσω φαινομένων όπως η θερμική αντίσταση Kapitza, η σκέδαση φωνονίων και η ασυμφωνία στην πυκνότητα καταστάσεων (Density of States – DOS). Το πάχος της μπορεί να κυμαίνεται από 1-5 φορές το πάχος του πληρωτικού υλικού και η δομή της μπορεί να είναι άμορφη, ημι-κρυσταλλική και κρυσταλλική. Για την διερεύνηση της χρησιμοποιούνται τεχνικές μικροσκοπίας και φασματοσκοπίας όπως είναι η TEM, SEM AFM, Raman και TDTR.

Έπειτα, με τη βοήθεια υπολογιστικών μεθόδων και διάφορων πακέτων λογισμικού (OpenFOAM, GMSH, Paraview καθώς και λογισμικό Autopilot που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας του κ. Τσιαντή), δημιουργήθηκαν περιπτώσεις που επιλύθηκαν στον cluster του Εργαστηρίου Ρευστομηχανικής και Στροβιλομηχανών του Τμήματος. Σε αυτές τις περιπτώσεις μελετήθηκε η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού για διάφορα πάχη διεπιφανειών καθώς και παράγοντες όπως ο λόγος αγωγιμότητας των υλικών  $k_f/k_m$ , η συγκέντρωση και γεωμετρία των φυλλιδίων. Η επιβεβαίωση πως η διεπιφάνεια πληρωτικού και μητρικού υλικού επηρεάζει τη συνολική θερμική αγωγιμότητα του υλικού αποτελεί σημαντικό εργαλείο για το σχεδιασμό υλικών εκμεταλλευόμενοι τρόπους δημιουργίας των σύνθετων υλικών που να επεμβαίνουν σε αυτή τη διεπιφάνεια.

Λέξεις – κλειδιά: Σύνθετα πολυμερικά υλικά, θερμική αγωγιμότητα, διεπιφάνεια πληρωτικού – μητρικού υλικού.

# THESIS

Study of the Effect of the Interface between Matrix and Fillers on the Thermal Conductivity of Composite Polymer Materials.

KYRIAKIS GEORGIOS

Department of Mechanical Engineering, University of Thessaly, 2025

Supervisor: Dr. Thanasis Papathanasiou,  
Professor of Rheology and Polymers Processes

## Abstract

The demand for the development of new polymeric products with increasingly improved thermal, mechanical, and optical properties—combined with low manufacturing cost, long service life, and environmental friendliness—has been the driving force behind ongoing research and progress in this field. The advancement of composite polymeric materials requires establishing a clear link between the microstructure of the material—such as its chemical composition, molecular architecture, and morphology—and its physical properties.

In the present thesis, the thermal conductivity of composite polymeric materials reinforced with platelets is investigated, with particular emphasis on the study of the interfacial thickness between the matrix and the filler material. This interface plays a critical role in heat transfer within the composite, as the local thermal resistance is modified in this region.

As a first step, an extensive literature review was conducted on previous research concerning interfaces, since this area is rapidly evolving. The interface is not a sharply defined boundary but rather a zone of finite thickness, which depends on the nature of the materials, the preparation processes, and the operating conditions. It strongly influences the thermal behavior of the composite through phenomena such as Kapitza thermal resistance, phonon scattering, and density-of-states (DOS) mismatch. Its thickness may range from one to five times that of the filler, and its structure can be amorphous, semi-crystalline, or crystalline. To probe these features, various microscopy and spectroscopy techniques are employed, such as TEM, SEM, AFM, Raman, and TDTR.

Subsequently, using computational methods and different software packages (OpenFOAM, GMSH, Paraview, as well as the Autopilot software developed in the framework of Mr. Tsiantis' thesis), a series of cases were created and solved on the cluster of the Laboratory of Fluid Mechanics and Turbomachinery of the Department. These cases explored the thermal conductivity of the composite for different interfacial thicknesses, as well as factors such as the conductivity ratio of the materials  $k_f/k_m$ , the concentration, and the geometry of the flakes. Confirming that the interface between filler and matrix significantly affects the overall thermal conductivity of the material provides a valuable tool for material design, by exploiting ways of tailoring the composite structure through interfacial engineering.

Keywords: Polymer composites, thermal conductivity, matrix – flake interface, thermal resistance

## Περιεχόμενα

|                                                                      |    |
|----------------------------------------------------------------------|----|
| Θέμα: .....                                                          | 2  |
| ΚΥΡΙΑΚΗ ΓΕΩΡΓΙΟΥ .....                                               | 2  |
| Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής: .....     | 4  |
| Ευχαριστίες .....                                                    | 5  |
| <br>                                                                 |    |
| 1. Βιβλιογραφική Ανασκόπηση .....                                    | 1  |
| 1.1. Πολυμερή Υλικά .....                                            | 1  |
| 1.2. Σύνθετα Υλικά .....                                             | 4  |
| 1.3. Σύνθετα Πολυμερή Υλικά .....                                    | 6  |
| 1.4. Σύνθετα Πολυμερή Υλικά με Βαθμωτή Μικροδομή .....               | 7  |
| 1.5. Μεταφορά Θερμότητας με Αγωγή .....                              | 8  |
| 1.6. Θερμικές Αντιστάσεις σε σειρά .....                             | 10 |
| 1.7. Θερμικές Αντιστάσεις εν Παραλλήλω .....                         | 11 |
| 1.8. Μεταφορά Θερμότητας σε Σύνθετα Υλικά .....                      | 12 |
| <br>                                                                 |    |
| 2. Μελέτη Διεπιφάνειας Μητρικού-Πληρωτικού Υλικού .....              | 14 |
| 2.1. Εισαγωγή .....                                                  | 14 |
| 2.2. Ανασκόπηση Βιβλιογραφίας .....                                  | 14 |
| 2.3. Μορφολογία και Δομή της Διεπιφάνειας .....                      | 15 |
| 2.4. Πάχος Διεπιφάνειας και Σχέση με Πληρωτικό Υλικό .....           | 17 |
| 2.5. Ιδιότητες Διεπιφάνειας .....                                    | 19 |
| 2.6. Θερμική Αντίσταση και Μηχανισμοί Σκέδασης στη Διεπιφάνεια ..... | 20 |
| 2.7. Τεχνικές Χαρακτηρισμού της Διεπιφάνειας .....                   | 21 |
| 2.8. Στρατηγικές Ελέγχου και Βελτιστοποίησης της Διεπιφάνειας .....  | 23 |
| 2.9. Συμπεράσματα και Μελλοντικές Προοπτικές .....                   | 24 |
| <br>                                                                 |    |
| 3. Ανάλυση του Υπολογιστικού Μοντέλου .....                          | 24 |
| 3.1 Δημιουργία Υπολογιστικού Μοντέλου .....                          | 25 |
| 3.2 Κατασκευή Γεωμετρίας - Υπολογιστικού Πλέγματος .....             | 25 |
| 3.2.1 Autopilot .....                                                | 25 |
| 3.2.2 Gmsh – Υπολογιστικό Πλέγμα .....                               | 26 |
| 3.3 Κατασκευή Γεωμετρίας - Υπολογιστικού Πλέγματος .....             | 28 |
| 3.3.1 OpenFoam .....                                                 | 28 |
| 3.3.2 Μέθοδος Πεπερασμένων Όγκων (FVM) .....                         | 30 |
| 3.3.3 Αρχικές και Συνοριακές Συνθήκες .....                          | 31 |
| 3.4 Επεξεργασία Αποτελεσμάτων .....                                  | 32 |
| <br>                                                                 |    |
| 4. Αποτελέσματα Υπολογιστικής Μελέτης .....                          | 32 |
| 4.1 Επίδραση πάχους διεπιφάνειας .....                               | 33 |
| 4.1.1 Διαγράμματα $(k_{eff})/(k_f/k_m)$ .....                        | 33 |
| 4.1.2 Διαγράμματα $(k_{eff})/(af)$ .....                             | 41 |

|                                                                            |           |
|----------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>4.2 Οπτικοποίηση Αποτελεσμάτων με το Paraview .....</b>                 | <b>44</b> |
| <b>4.2.1 Επίδραση <math>kf/km</math> στην θερμική αγωγιμότητα. ....</b>    | <b>45</b> |
| <b>4.2.2 Επίδραση <math>\alpha_f</math> στην θερμική αγωγιμότητα. ....</b> | <b>47</b> |
| <b>5. Συμπεράσματα – Σχολιασμός Αποτελεσμάτων.....</b>                     | <b>52</b> |
| <b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ .....</b>                                                   | <b>54</b> |
| <b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α – ΧΩΡΙΚΗ ΣΥΓΚΛΙΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ.....</b>                        | <b>54</b> |
| <b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β – Θερμοκρασιακά πεδία. Φωτογραφίες από Paraview.....</b>    | <b>57</b> |
| <b>Βιβλιογραφία .....</b>                                                  | <b>67</b> |

# 1. Βιβλιογραφική Ανασκόπηση

Στα παρακάτω κεφάλαια θα γίνει μια αναφορά στα πολυμερή σύνθετα υλικά που διαθέτουν βαθμωτή μικροδομή, σε τι οφείλουν τον ορισμό τους, στα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα τους καθώς και στις διάφορες εφαρμογές που επιλέγονται να αξιοποιηθούν οι ιδιαίτερες ιδιότητες τους.

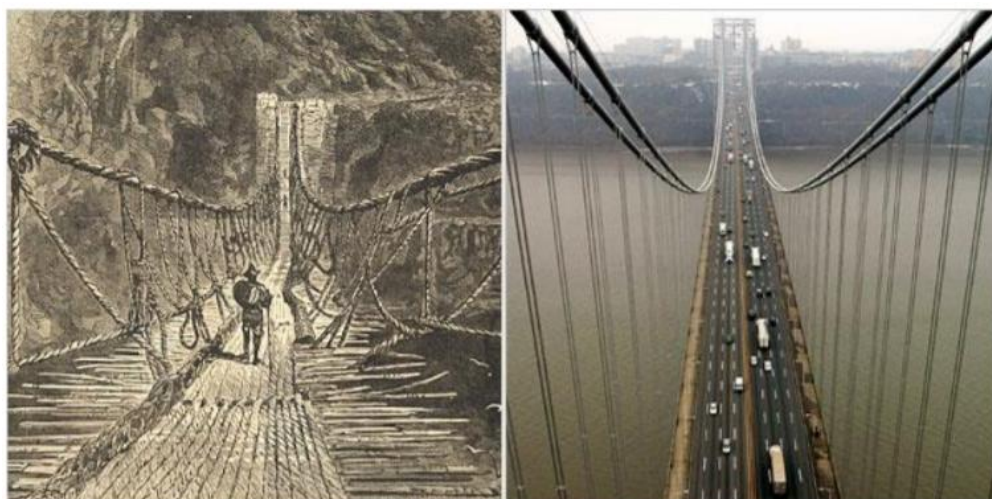
## 1.1. Πολυμερή Υλικά

Τα πολυμερή αποτελούν υλικά που σχηματίζονται από πολύ μεγάλα μόρια, τα λεγόμενα μακρομόρια. Αυτά δημιουργούνται μέσω της επαναλαμβανόμενης ένωσης μικρότερων δομικών μονάδων, των μονομερών, τα οποία συνδέονται μεταξύ τους με ισχυρούς ομοιοπολικούς δεσμούς. Ολόκληρος ο κόσμος γύρω μας είναι γεμάτος από πολυμερή: τα αντικείμενα καθημερινής χρήσης, το χαρτί, τα υφάσματα, ακόμη και οι ίδιοι οι ζωντανοί οργανισμοί βασίζονται σε πολυμερικές δομές.

Γενικά, τα πολυμερή χωρίζονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες: τα φυσικά και τα συνθετικά. Στα φυσικά πολυμερή συναντάμε υλικά όπως το ξύλο, το μετάξι, το βαμβάκι, τις βιολογικές ίνες, τα οστά αλλά και το DNA. Σε αυτή την εργασία όμως θα εστιάσουμε στα συνθετικά πολυμερή, δηλαδή εκείνα που δημιουργήθηκαν από τον άνθρωπο. Πρόκειται για υλικά που προέρχονται από οργανικές πρώτες ύλες του πετρελαίου και χρησιμοποιούνται σε πλήθος εφαρμογών. Στην ομάδα αυτή ανήκουν ο βακελίτης, το νάιλον, το PVC, το πολυστυρένιο και πολλά ακόμη. Από εδώ και στο εξής, ο όρος πολυμερές θα αναφέρεται αποκλειστικά στα συνθετικά πολυμερή.

Τα υλικά αυτά παρουσιάζουν πολλά πλεονεκτήματα: μπορούν να πάρουν εύκολα ποικίλες μορφές, να δώσουν προϊόντα με πολύπλοκα σχήματα, να αντικαταστήσουν το γυαλί χάρη στη διαφάνειά τους, ενώ διαθέτουν μικρή πυκνότητα, ικανοποιητικές μηχανικές ιδιότητες και χαμηλό κόστος παραγωγής. Ωστόσο, συνοδεύονται και από σημαντικά μειονεκτήματα. Έχει αποδειχθεί ότι τα πλαστικά αποτελούν έναν από τους βασικούς παράγοντες ρύπανσης του περιβάλλοντος. Επιπλέον, επειδή η παραγωγή τους εξαρτάται άμεσα από το πετρέλαιο –μια μη ανανεώσιμη πρώτη ύλη–, επιβαρύνουν ακόμη περισσότερο τον πλανήτη και επηρεάζονται άμεσα από τις διακυμάνσεις στην τιμή και την πολιτική του.

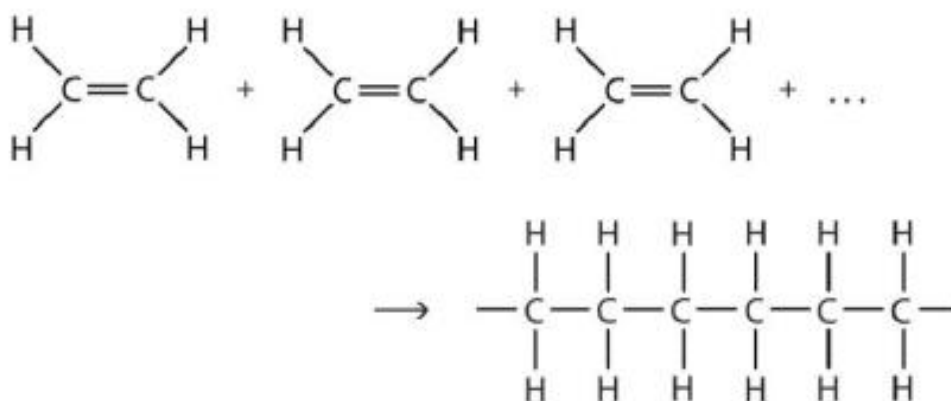
Αξίζει τέλος να σημειωθεί ότι η λέξη «πολυμερές» προέρχεται από τις ελληνικές λέξεις «πολύ» και «μέρος», γεγονός που αποτυπώνει με ακρίβεια την πληθώρα των μοριακών μονάδων που απαρτίζουν το μακρομόριο.



**Σχ.1.1** - Κατασκευή γέφυρας με χρήση φυσικών πολυμερών (αριστερά) και σύγχρονη έκδοση της με χρήση βιομηχανικών σύνθετων πολυμερών (δεξιά)

Η δημιουργία των πολυμερών, δηλαδή η ένωση πολλών όμοιων μορίων που ονομάζονται μονομερή, επιτυγχάνεται κυρίως με δύο μεθόδους: τον πολυμερισμό και την πολυσυμπύκνωση. Στην περίπτωση του πολυμερισμού προκύπτουν πολυμερή με χημική σύσταση όμοια με εκείνη των αρχικών μονομερών. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η μετατροπή του αιθυλενίου σε πολυαιθυλένιο. Με τη διαδικασία αυτή είναι δυνατόν να σχηματιστούν προϊόντα με διπλάσιο, τριπλάσιο ή γενικότερα πολλαπλάσιο μοριακό βάρος σε σχέση με το μονομερές. Ο πολυμερισμός μπορεί να πραγματοποιηθεί με την επίδραση θερμότητας, ελεύθερων ριζών, καταλυτών ή ακτινοβολίας· για τον λόγο αυτό διακρίνεται σε θερμικό, ριζικό, καταλυτικό ή ακτινοβολιακό πολυμερισμό.

Ο πολυμερισμός εφαρμόζεται είτε σε καθαρά μονομερή είτε σε διαλύματα και γαλακτώματά τους. Οι ιδιότητες και η ποιότητα των παραγόμενων πολυμερών εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από φυσικοχημικούς παράγοντες, όπως τα χαρακτηριστικά του μονομερούς, η πίεση, το περιβάλλον της διεργασίας, η θερμοκρασία καθώς και η παρουσία ξένων ουσιών, προσμείξεων, διεγερτών ή σταθεροποιητών. Ανάλογα με τις συνθήκες παραγωγής και τις επιμέρους προσθήκες, προκύπτουν πολυμερή με διαφορετικό μοριακό βάρος και, κατ' επέκταση, με διαφορετικές φυσικές και μηχανικές ιδιότητες. (W.D. Callister Jr. 1999)



**Σχ.1.2** – Πολυμερισμός αιθυλενίου

Η δεύτερη βασική μέθοδος σύνθεσης πολυμερών είναι η πολυσυμπύκνωση, η οποία διακρίνεται σε δύο τύπους ανάλογα με τα μονομερή που συμμετέχουν. Όταν η αντίδραση πραγματοποιείται ανάμεσα σε όμοια μονομερή, όπως για παράδειγμα τα αμινοξέα, η διαδικασία ονομάζεται ομοπολυσυμπύκνωση. Αντίθετα, όταν αντιδρούν διαφορετικά μονομερή, όπως ένα δικαρβονικό οξύ με μια διαμίνη, τότε μιλάμε για ετεροπολυσυμπύκνωση.

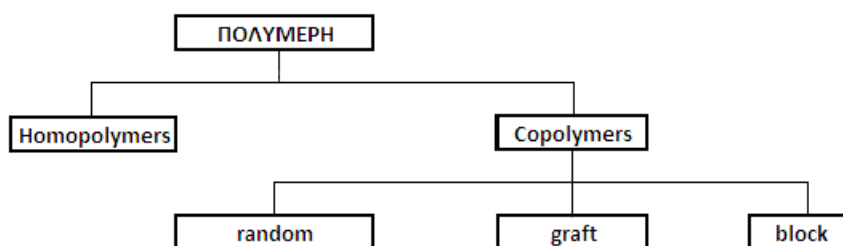
Την πορεία της πολυσυμπύκνωσης και τις ιδιότητες των τελικών πολυμερών επηρεάζουν διάφοροι παράγοντες. Ανάμεσα στους πιο καθοριστικούς είναι η θερμοκρασία στην οποία λαμβάνει χώρα η αντίδραση, η μοριακή δομή των αρχικών μονομερών, το είδος των καταλυτών που χρησιμοποιούνται καθώς και η ποσότητά τους. Στη βιομηχανική παραγωγή, η μέθοδος αυτή αξιοποιείται ευρέως για την παρασκευή συνθετικών ρητινών, πολυαμιδίων, πολυεστέρων και άλλων πολυμερών.

Επιπλέον, τα πολυμερή ταξινομούνται και με βάση τη μηχανική συμπεριφορά τους σε υψηλές θερμοκρασίες, κατηγοριοποίηση που παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.3.



**Σχ.1.3** – Κατάταξη πολυμερών βάσει των μηχανικών τους ιδιοτήτων σε υψηλές θερμοκρασίες

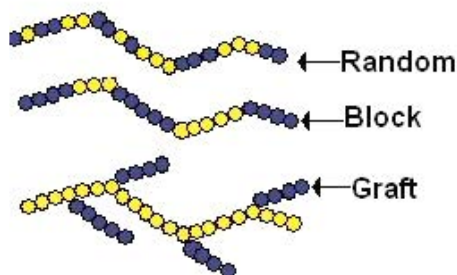
Μία ακόμη βασική κατηγοριοποίηση των πολυμερών μπορεί να γίνει με βάση το αν τα μονομερή που συγκροτούν την πολυμερική αλυσίδα είναι ίδια ή διαφορετικά. Έτσι, όταν όλα τα δομικά στοιχεία είναι όμοια, προκύπτουν τα ομοπολυμερή (homopolymers), ενώ όταν συμμετέχουν δύο ή περισσότερα διαφορετικά μονομερή, προκύπτουν τα συμπολυμερή (copolymers). Το Σχήμα 1.4 παρουσιάζει σχηματικά αυτή τη διάκριση.



**Σχ.1.4** – Κατάταξη πολυμερών βάσει των δομικών τους μονάδων (μονομερή)

Από το ίδιο σχήμα φαίνεται ότι τα συμπολυμερή χωρίζονται περαιτέρω σε τρεις κατηγορίες: random, graft και block copolymers. Ο διαχωρισμός αυτός βασίζεται στον τρόπο με τον οποίο τα διαφορετικά μονομερή εναλλάσσονται ή συνδέονται μέσα στην πολυμερική αλυσίδα.

Στο Σχήμα 1.5 απεικονίζονται παραστατικά οι διαφορετικές μορφές που μπορεί να έχει η αλυσίδα ενός συμπολυμερούς, ανάλογα με τη διάταξη των δομικών του μονάδων.



Σχ.1.5 – Περιπτώσεις της δομής των συμπολυμερών

## 1.2. Σύνθετα Υλικά

Τα σύνθετα υλικά ορίζονται ως προϊόντα που προκύπτουν από το συνδυασμό δύο ή περισσότερων διαφορετικών υλικών, καθένα από τα οποία διαθέτει ξεχωριστές ιδιότητες. Μέσα από αυτή τη μίξη επιτυγχάνεται μια βελτιωμένη συνολική συμπεριφορά, η οποία ονομάζεται αρχή της συνδυασμένης δράσης.

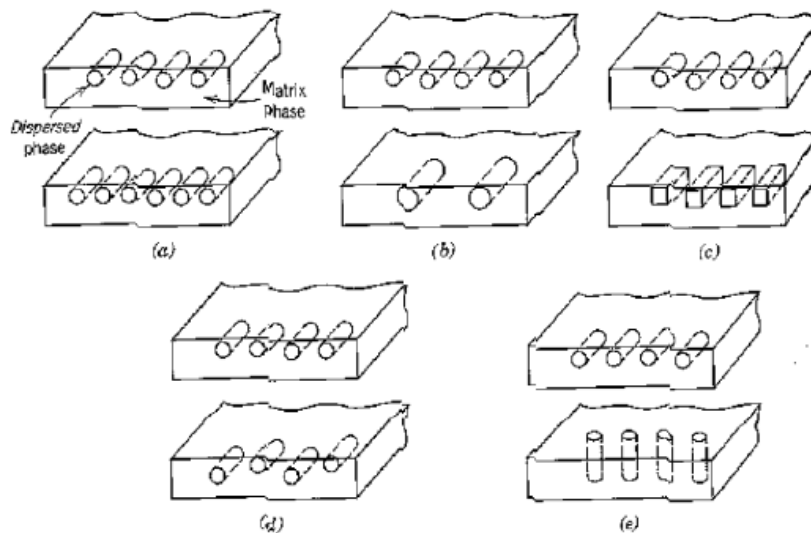
Η ευρεία χρήση των συνθέτων υλικών οφείλεται σε χαρακτηριστικά όπως το χαμηλό τους βάρος, η υψηλή μηχανική αντοχή, η ανθεκτικότητα σε κόπωση, κρούση και διάδοση ρωγμών, η εξαιρετική αντίσταση στη διάβρωση, αλλά και το χαμηλό κόστος συντήρησης σε συνδυασμό με σχετικά απλές μεθόδους κατασκευής. Παρά τα πλεονεκτήματά τους, παρουσιάζουν και ορισμένα μειονεκτήματα, όπως η αυξημένη τάση για ερπυσμό, η ευαισθησία σε δυσμενή περιβάλλοντα (υψηλές θερμοκρασίες, χημικά ή θαλάσσια περιβάλλοντα), η μικρή αντοχή σε μηχανική φθορά, καθώς και το σχετικά υψηλό αρχικό κόστος. Ωστόσο, χάρη στη συνεχή τεχνολογική εξέλιξη στην ανάπτυξη νέων ινών, ρητινών και μεθόδων παραγωγής, τα προβλήματα αυτά σταδιακά περιορίζονται.

Η δομή των συνθέτων υλικών αποτελείται από δύο φάσεις:

- Τη μήτρα, η οποία είναι η συνεχής φάση που περιβάλλει το ενισχυτικό μέσο και χαρακτηρίζεται από χαμηλή πυκνότητα. Η επιλογή της γίνεται με βάση το περιβάλλον χρήσης και τη θερμοκρασία λειτουργίας.
- Τη διεσπαρμένη φάση (ή ενίσχυση), η οποία προσδίδει στο σύνθετο τις βελτιωμένες μηχανικές, θερμικές και άλλες ιδιότητες.

Η καλή συνεργασία ανάμεσα στη μήτρα και την ενίσχυση είναι καθοριστική για την απόδοση του υλικού. Η περιοχή επαφής τους ορίζεται ως διεπιφάνεια, η οποία επηρεάζει άμεσα τη συνοχή και τη μηχανική συμπεριφορά του συνθέτου. (Κ. Παναγιώτου, 2000)

Εκτός από τα μακροσκοπικά χαρακτηριστικά, οι ιδιότητες των συνθέτων καθορίζονται επίσης από μικροσκοπικούς παράγοντες των ενισχυτικών μέσων, όπως η συγκέντρωση, το σχήμα, το μέγεθος, η κατανομή, ο προσανατολισμός και το μήκος τους. Οι παράμετροι αυτοί σε συνδυασμό με τα ποσοστά συμμετοχής των δύο φάσεων καθορίζουν την τελική συμπεριφορά του υλικού. (βλ. Σχήμα 1.6):



**Σχ.1.6** – Διάφορα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που επηρεάζουν τις ιδιότητες των σύνθετων υλικών:  
(α) συγκέντρωση, (β) μέγεθος, (γ) σχήμα, (δ) κατανομή, (ε) προσανατολισμός

Με βάση τη γεωμετρία της διεσπαρμένης φάσης, τα σύνθετα υλικά ταξινομούνται σε τρεις κύριες κατηγορίες (βλ. Σχήμα 1.7):

1. Σωματιδιακά σύνθετα, όπου η ενίσχυση έχει περίπου ίδιες διαστάσεις σε όλες τις κατευθύνσεις.
2. Ινώδη σύνθετα, όπου η ενίσχυση έχει μορφή με μεγάλο λόγο μήκους προς πάχος (π.χ. ίνες).
3. Δομικά σύνθετα, τα οποία αποτελούν συνδυασμό σύνθετων με ομοιογενή υλικά.

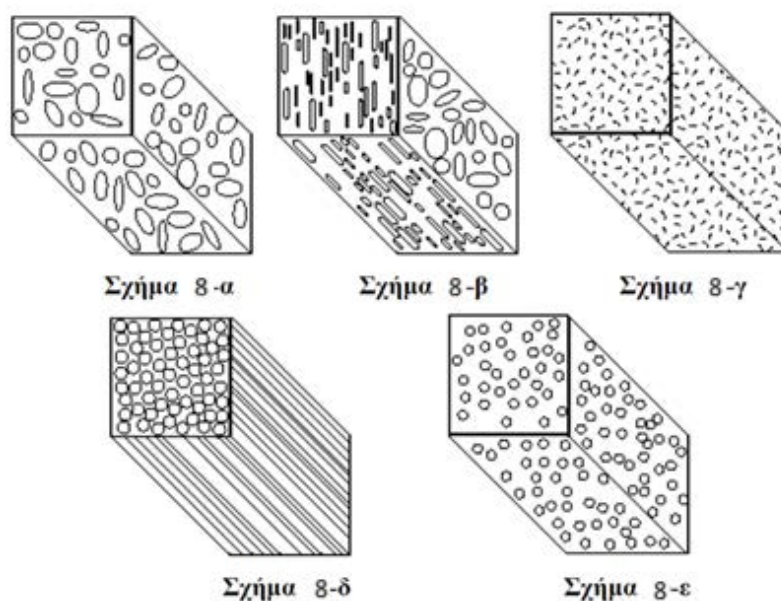
Κάθε μία από αυτές τις κατηγορίες διαθέτει περαιτέρω υποδιαιρέσεις και εξειδικεύσεις, ανάλογα με τη χρήση και τις απαιτήσεις των εφαρμογών.(Γ. Παπανικολάου, Μουζάκης, 2007)



**Σχ.1.7** – Ταξινόμηση των διάφορων τύπων σύνθετων υλικών

### 1.3. Σύνθετα Πολυμερή Υλικά

Με τον όρο σύνθετα πολυμερή υλικά περιγράφουμε τα πολυμερή που έχουν ενισχυθεί με σωματίδια διαφορετικών μορφών, όπως φυλλίδια (flakes), σφαιρικά σωματίδια ή ίνες. Ο προσανατολισμός της ενίσχυσης μπορεί να είναι είτε καθορισμένος, οπότε μιλάμε για ευθυγραμμισμένα συστήματα, είτε τυχαίος, οπότε έχουμε random συστήματα. Στο Σχήμα 1.8 παρουσιάζονται οι διαφορετικοί τύποι σύνθετων πολυμερών.



**Σχ.1.8-(α):** Φυλλίδια τυχαίου προσανατολισμού

**Σχ.1.8-(β):** Φυλλίδια ορισμένου προσανατολισμού (κάθετα στις πάνω και κάτω επιφάνειες της μήτρας)

**Σχ.1.8-(γ):** Ίνες μικρού μήκους και τυχαίου προσανατολισμού

**Σχ.1.8-(δ):** Ίνες μεγάλου μήκους και συγκεκριμένου προσανατολισμού

**Σχ.1.8-(ε):** Σφαιρικά σωματίδια

Στο πλαίσιο αυτής της μελέτης δίνεται ιδιαίτερη έμφαση σε σύνθετα πολυμερή που περιλαμβάνουν ως ενισχυτικό υλικό φυλλίδια. Τέτοιου είδους υλικά συναντώνται σε πλήθος εφαρμογών, κυρίως ως μονωτικά μέσα. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι οι συσκευασίες τροφίμων, όπου ο βασικός στόχος είναι η αποτροπή της διείσδυσης οξυγόνου, υδατμών και/ή διοξειδίου του άνθρακα. Τα ενισχυτικά αυτά υλικά μπορεί να προέρχονται είτε από ανόργανες ουσίες – όπως γυαλί, άνθρακας, κεραμικά ή μέταλλα – είτε από οργανικά πολυμερή.

Τα τελευταία χρόνια το γραφείο έχει προσελκύσει ιδιαίτερο ερευνητικό ενδιαφέρον, καθώς θεωρείται ιδανικό ενισχυτικό υλικό σε πολυμερή σύνθετα. Η μοναδική του συνδυασμένη απόδοση – εξαιρετικές μηχανικές, θερμικές και οπτικές ιδιότητες, υψηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα, άριστη κρυσταλλική δομή και μεγάλη ενεργή επιφάνεια – το καθιστούν κατάλληλο για προηγμένες εφαρμογές. Ενδεικτικά,

χρησιμοποιείται σε υλικά αποθήκευσης και παραγωγής ενέργειας (όπως οι ηλιακοί συλλέκτες), σε ηλεκτρονικές συσκευές, σε βιολογικούς και χημικούς αισθητήρες, καθώς και σε τεχνολογίες περιβαλλοντικής απολύμανσης και αφαλάτωσης νερού.

Επιπλέον, άλλα είδη φυλλιδιακών ενισχυτικών έχουν επίσης πρακτικές χρήσεις: τα φυλλίδια mica ενσωματώνονται σε βαφές για την προστασία μετάλλων από διάβρωση, οι επικαλύψεις με πηλό χρησιμοποιούνται για την απορρόφηση νερού και την προστασία ηλεκτρονικών συσκευών, ενώ τα **γυάλινα φυλλίδια** αξιοποιούνται στην επικάλυψη μεγάλων δεξαμενών, καθώς προσφέρουν υψηλή αντίσταση στη διείδυση υγρών και αερίων.

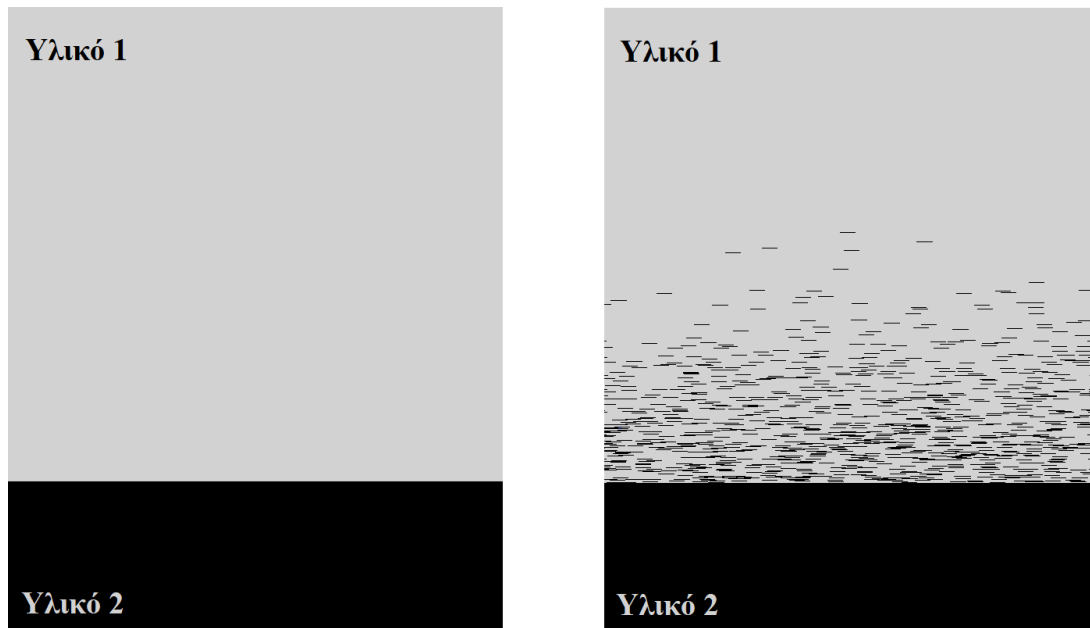
Ορισμένες απ' τις εφαρμογές των σύνθετων υλικών σε διάφορες βιομηχανίες παρουσιάζονται στον Πίνακα 1:

| ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ          | ΕΦΑΡΜΟΓΗ                                                                       |
|---------------------|--------------------------------------------------------------------------------|
| Αθλητικών ειδών     | Καλάμια ψαρέματος, μπαστούνια γκολφ, πισίνες, βάρκες, σκι κτλ.                 |
| Οικιακού εξοπλισμού | Προκατασκευασμένες οικίες, καρέκλες, τραπέζια, σκάλες κτλ.                     |
| Χημική              | Σωλήνες, δεξαμενές, δοχεία υψηλής πίεσης κτλ.                                  |
| Ηλεκτρική           | Διακόπτες, μονωτικά υλικά κτλ.                                                 |
| Αυτοκινήτων         | Τμήματα σκελετού, προφυλακτήρες, πλαίσιο οργάνων, άξονες κτλ.                  |
| Ναυπηγική           | Σκαριά πλοίων, κατάστρωμα, κατάρτια κτλ.                                       |
| Αεροσκαφών          | Πτερύγια, σκελετός αεροσκάφους, σύστημα προσγείωσης, πτερύγια ελικοπτέρων κτλ. |

#### 1.4. Σύνθετα Πολυμερή Υλικά με Βαθμωτή Μικροδομή

Στον τομέα της επιστήμης υλικών, τα Σύνθετα Υλικά με Βαθμωτή Μικροδομή ή Functionally Graded Composite Materials (FGCMs) (Gururaja Udupa, S. Shrikantha Rao, K.V. Gangadharan, 2014), ξεχωρίζουν λόγω της προοδευτικής μεταβολής που παρουσιάζουν στη σύσταση, στη δομή αλλά και στην πυκνότητα του ενισχυτικού υλικού μέσα στη μήτρα. Σε αντίθεση με τα συμβατικά σύνθετα, όπου η μετάβαση από το ένα υλικό στο άλλο είναι απότομη και συχνά οδηγεί σε αδυναμίες ή αστοχίες, στα FGCMs η αλλαγή γίνεται σταδιακά, με αποτέλεσμα να συνδυάζονται αποτελεσματικά οι ιδιότητες και των δύο συστατικών. Έτσι, επιτυγχάνεται βελτίωση σε κρίσιμα χαρακτηριστικά όπως η θερμική και διαβρωτική αντοχή, η ελαστικότητα και η ανθεκτικότητα, περιορίζοντας φαινόμενα όπως η διάβρωση, η κόπωση και η θραύση.

Η έρευνα γύρω από τα FGCMs ξεκίνησε το 1984 και τα τελευταία χρόνια η ανάπτυξή τους γνωρίζει σημαντική άνθηση. Ειδικότερα, οι αεροδιαστημικές εφαρμογές και η βιομηχανία ηλεκτρονικών κυκλωμάτων δείχνουν έντονο ενδιαφέρον για τη θερμική τους συμπεριφορά, καθώς τα υλικά αυτά είναι ικανά να αντέξουν σε ιδιαίτερα υψηλές θερμοκρασίες. Ο συνδυασμός κεραμικού στρώματος με μεταλλικό υπόστρωμα είναι μια χαρακτηριστική προσέγγιση για την επίτευξη αυτών των ιδιοτήτων. (Wikipedia page on: "Functionally Graded Materials").



**Σχ.1.9** – Σύνθετο Υλικό με ‘απότομη’ μετάβαση από το ένα υλικό στο άλλο (αριστερά) και Σύνθετο Υλικό με Βαθμωτή Μικροδομή (FGCM) με ομαλή μετάβαση από το ένα υλικό στο άλλο (δεξιά)

Με τη συνεχή βελτίωση των μεθόδων παρασκευής, το κόστος παραγωγής των FGCMs μειώνεται, γεγονός που ενισχύει τη διείσδυσή τους σε νέες αγορές. Σήμερα συναντώνται σε τομείς όπως η αυτοκινητοβιομηχανία, η ιατρική τεχνολογία, ο αθλητικός εξοπλισμός, η ενέργεια, αλλά και σε προηγμένους αισθητήρες (Rasheedat M. Mahamood, Esther T. Akinlabi, Mukul Shukla, Sisa Pityana, 2012).

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, το ενδιαφέρον επικεντρώνεται σε σύνθετα υλικά ενισχυμένα με φυλλίδια, όπου η κατανομή της ενίσχυσης δεν είναι ομοιόμορφη αλλά ακολουθεί βαθμωτή μικροδομή. Η διεσπαρμένη φάση έχει τη μορφή φυλλιδίων, τα οποία είναι ευθυγραμμισμένα μεταξύ τους και προσανατολισμένα παράλληλα προς τις άνω και κάτω επιφάνειες της μήτρας.

### 1.5. Μεταφορά Θερμότητας με Αγωγή

Η αγωγή αποτελεί έναν από τους βασικούς μηχανισμούς μεταφοράς θερμότητας. Πρόκειται για τη διαδικασία κατά την οποία η θερμική ενέργεια μεταδίδεται μέσα από ένα υλικό χωρίς μετακίνηση μάζας, ως αποτέλεσμα της διαφοράς θερμοκρασίας μεταξύ δύο σημείων. (Y. A. Cengel & A. J. Ghajar, 2015)

Μαθηματικά, το φαινόμενο αυτό περιγράφεται από τον νόμο του Fourier:

$$q = -k\nabla T \quad (1.1)$$

όπου:

- $q$  είναι η πυκνότητα θερμικής ροής ( $W/m^2$ ),
- $k$  η θερμική αγωγιμότητα του υλικού ( $W/mK$ ),
- $\nabla T$  η χωρική μεταβολή της θερμοκρασίας.

Σε μόνιμη κατάσταση και για επίπεδο τοίχωμα πάχους  $L$ , η θερμική ροή υπολογίζεται από τη σχέση:

$$Q = \frac{kA(T_1 - T_2)}{L} \quad (1.2)$$

όπου  $A$  είναι η επιφάνεια μεταφοράς και  $T_1, T_2$  οι θερμοκρασίες στις δύο πλευρές του τοιχώματος.

Η θερμική αγωγιμότητα  $k$  σχετίζεται με τη θερμική διαχυτότητα  $a$  του υλικού μέσω της σχέσης:

$$k = a * \rho * c_p \quad (1.3)$$

όπου:

- $a$  είναι η θερμική διαχυτότητα ( $m^2/s$ ),
- $\rho$  η πυκνότητα του υλικού ( $kg/m^3$ ),
- $c_p$  η ειδική θερμότητα υπό σταθερή πίεση ( $J/kgK$ ).

Για πιο περίπλοκες διατάξεις θερμικής αγωγής, χρησιμοποιείται συχνά το μοντέλο θερμικών αντιστάσεων, το οποίο λειτουργεί κατ' αναλογία με τα ηλεκτρικά κυκλώματα. Η θερμική αντίσταση ορίζεται ως:

$$R_{th} = \frac{L}{kA} \quad (1.4)$$

και η θερμική ροή προκύπτει από:

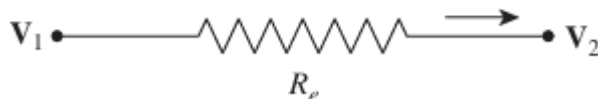
$$Q = \frac{\Delta T}{R_{th}} \quad (1.5)$$

$$\dot{Q} = \frac{T_1 - T_2}{R}$$



(a) Heat flow

$$I = \frac{V_1 - V_2}{R_e}$$



(b) Electric current flow

**Σχήμα 1.10:** Η αναλογία ανάμεσα στις έννοιες της (a) θερμικής αντίστασης και (b) ηλεκτρικής αντίστασης

## 1.6. Θερμικές Αντιστάσεις σε σειρά

Όταν η θερμότητα διαπερνά διαδοχικά περισσότερα από ένα υλικά ή στρώσεις, τότε οι αντίστοιχες θερμικές αντιστάσεις τους αθροίζονται, όπως ακριβώς συμβαίνει με τις ηλεκτρικές αντιστάσεις που συνδέονται σε σειρά:

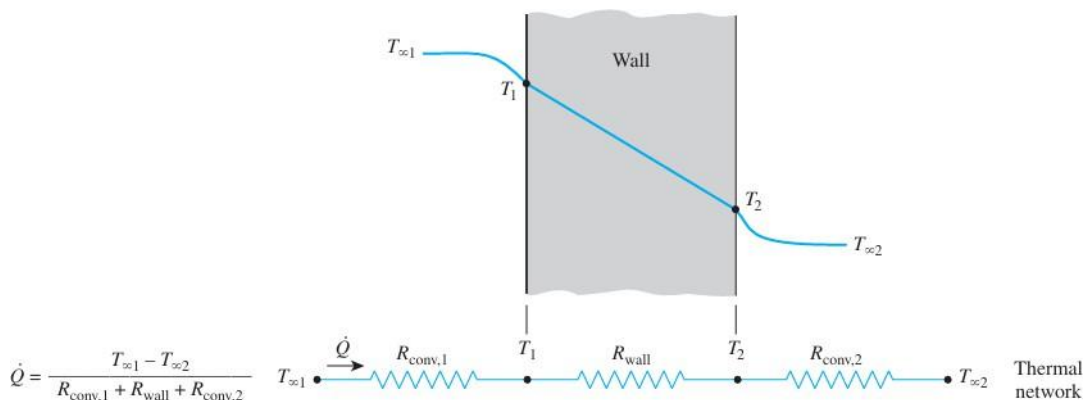
$$R_{total} = R_1 + R_2 + R_3 + \dots \quad (1.6)$$

Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι μια τοιχοποιία που αποτελείται από διαφορετικά υλικά, όπως τούβλο, θερμομονωτικό στρώμα και επίχρισμα. Στην περίπτωση αυτή, η συνολική θερμική αντίσταση του τοίχου είναι το άθροισμα των επιμέρους αντιστάσεων των στρωμάτων.

Η θερμική ροή που διαπερνά κάθε στρώση είναι ίδια και δίνεται από τη σχέση: Η κατανομή της θερμοκρασίας κατά μήκος του τοιχώματος εξαρτάται από τις

$$Q = \frac{T_{in} - T_{out}}{R_{total}} \quad (1.7)$$

θερμικές αγωγιμότητες των υλικών που το αποτελούν. Στα στρώματα με υψηλότερη θερμική αντίσταση παρατηρείται και η μεγαλύτερη πτώση θερμοκρασίας.



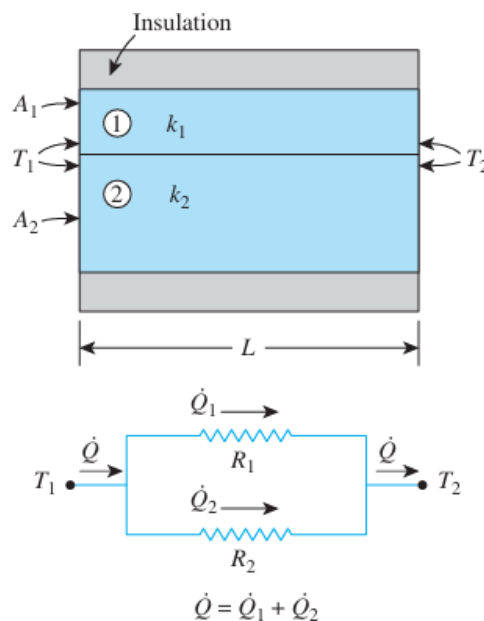
**Σχήμα 1.11:** Το δίκτυο της θερμικής αντίστασης για την μεταφορά θερμότητας μέσα από ένα επίπεδο τοίχο που υφίσταται συναγωγή και από τις δύο πλευρές.

## 1.7. Θερμικές Αντιστάσεις εν Παραλλήλω

Σε περιπτώσεις όπου η θερμότητα μπορεί να ακολουθήσει περισσότερες από μία διαδρομές μέσα από ένα σύστημα – για παράδειγμα λόγω ύπαρξης διαφορετικών υλικών ή κοιλοτήτων σε ένα επίπεδο – οι αντίστοιχες θερμικές αντιστάσεις θεωρούνται σε **παράλληλη διάταξη**. Σε αυτήν την περίπτωση, η συνολική θερμική αντίσταση υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\frac{1}{R_{total}} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} + \dots \quad (1.8)$$

Από την εξίσωση γίνεται σαφές ότι η συνολική θερμική αντίσταση ενός τέτοιου συστήματος είναι χαμηλότερη από κάθε επιμέρους αντίσταση ξεχωριστά. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα εφαρμογής είναι οι τοιχοποιίες που περιέχουν διαφορετικά ενσωματωμένα υλικά, τα οποία έρχονται σε επαφή με το εσωτερικό και εξωτερικό περιβάλλον (Y. A. Cengel & A. J. Ghajar, 2015).



**Σχήμα 1.12:** Δίκτυο θερμικής αντίστασης για δύο παράλληλα στρώματα, που στο πάνω και κάτω μέρος υπάρχει μόνωση.

Στο Σχήμα 1.12 φαίνεται το ισοδύναμο δίκτυο θερμικών αντιστάσεων για δύο παράλληλες στρώσεις με μόνωση στο πάνω και κάτω μέρος.

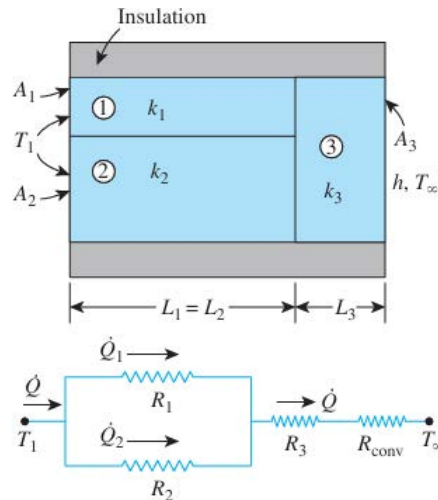
Η ολική θερμική ροή δίνεται από τη σχέση:

$$Q_{total} = Q_1 + Q_2 + Q_3 + \dots \quad (1.9)$$

με κάθε επιμέρους θερμική ροή να ορίζεται ως:

$$Q_i = \frac{\Delta T}{R_i} \quad (1.10)$$

όπου η διαφορά θερμοκρασίας είναι ίδια για όλες τις διαδρομές, αλλά η κατανομή της θερμικής ροής εξαρτάται από την τιμή της κάθε αντίστασης.



**Σχήμα 1.13:** Δίκτυο θερμικών αντιστάσεων για συνδυασμένη εν σειρά και εν παραλλήλω διάταξη

Στο Σχήμα 13 απεικονίζεται ένα δίκτυο θερμικών αντιστάσεων που περιλαμβάνει συνδυασμό εν σειρά και εν παραλλήλω διατάξεων. 2

Στην πραγματικότητα, πολλά θερμικά συστήματα λειτουργούν με αυτόν τον υβριδικό τρόπο. Το ίδιο συμβαίνει και στα σύνθετα υλικά: η μήτρα και τα σωματίδια ενίσχυσης σχηματίζουν μια ακολουθία αντιστάσεων σε σειρά, ενώ στην περιοχή της διεπιφάνειας μεταξύ μήτρας και ενίσχυσης δημιουργούνται θερμογέφυρες, οι οποίες μπορούν να θεωρηθούν ως παράλληλες αντιστάσεις που επηρεάζουν τη συνολική θερμική συμπεριφορά.

## 1.8. Μεταφορά Θερμότητας σε Σύνθετα Υλικά

Τα σύνθετα υλικά, λόγω της πολυφασικής τους δομής, αποτελούν αντικείμενο εντατικής έρευνας τα τελευταία χρόνια, ιδίως σε εφαρμογές όπου απαιτείται υψηλή απόδοση. Η μελέτη της θερμικής τους συμπεριφοράς έχει ιδιαίτερη σημασία, καθώς ο σχεδιασμός υλικών με αυξημένη θερμική αγωγιμότητα είναι κρίσιμος για τομείς όπως η ψύξη ηλεκτρονικών διατάξεων, η αεροδιαστημική, τα ευφυή υλικά και οι ενεργειακές τεχνολογίες. Ένας από τους βασικότερους παράγοντες που καθορίζουν τη θερμική απόδοσή τους είναι η διεπιφανειακή θερμική αντίσταση (ή Kapitza resistance) (Cahill et al., 2014), η οποία περιορίζει τη μετάδοση θερμότητας στο εσωτερικό των σύνθετων δομών.

Η θερμική μεταφορά στα υλικά αυτά πραγματοποιείται κυρίως μέσω **φωνονίων**, δηλαδή κβαντικών ταλαντώσεων του πλέγματος. Όταν δύο υλικά με διαφορετικές φωνονικές ιδιότητες έρχονται σε επαφή (διαφορετική μάζα, ταχύτητα διάδοσης ή κρυσταλλική δομή), μέρος της θερμότητας εμποδίζεται να περάσει, καθώς τα φωνόνια ανακλώνται στη διεπιφάνεια αντί να μεταδοθούν. Ο βαθμός μετάδοσης εξαρτάται από παράγοντες όπως η τραχύτητα της διεπιφάνειας, η ποιότητα συγκόλλησης και η θερμοδυναμική συμβατότητα των δύο υλικών. Η κατανόηση αυτού

του μηχανισμού είναι καθοριστική για τον σχεδιασμό υλικών υψηλής θερμικής απόδοσης, ιδιαίτερα σε μικρο- και νανοκλίμακα.

Η θεωρητική περιγραφή του φαινομένου γίνεται με τα μοντέλα Acoustic Mismatch Model (AMM) και Diffuse Mismatch Model (DMM), ενώ πιο σύγχρονες προσεγγίσεις, όπως η μεθοδολογία των Minnich & Chen (A. J. Munnich & G. Chen, 2007), επιτρέπουν φασματική ανάλυση της φωνονικής ροής και ακριβέστερη πρόβλεψη της διεπιφανειακής αντίστασης με βάση τις πραγματικές ιδιότητες των υλικών.

Στην πράξη, ακόμα και υλικά με εξαιρετικά υψηλή θερμική αγωγιμότητα – όπως οι νανοσωλήνες άνθρακα (CNTs) ή το γραφένιο – δεν εμφανίζουν την αναμενόμενη απόδοση στο σύνολο του σύνθετου υλικού, εφόσον η διεπιφάνεια με τη μήτρα δεν παρουσιάζει καλή σύζευξη. Σε πολλές περιπτώσεις, η διεπιφανειακή αντίσταση καθορίζει τη συνολική συμπεριφορά. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούνται τεχνικές όπως η λειτουργικοποίηση επιφανειών (π.χ. με ομάδες -OH ή -COOH) ή η προσθήκη ενδιάμεσων στρωμάτων, ώστε να ενισχυθεί η επαφή μεταξύ ενίσχυσης και μήτρας. Πειραματικά δεδομένα σε συστήματα epoxy-CNT έχουν δείξει πολλαπλή αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας όταν οι νανοσωλήνες έχουν τροποποιηθεί χημικά, γεγονός που οφείλεται στη βελτιωμένη διαβροχή και μείωση της θερμικής αντίστασης. Παρόμοιες βελτιώσεις έχουν καταγραφεί σε σύνθετα με γραφένιο και h-BN, όπου η καλύτερη σύνδεση των φύλλων δημιουργεί συνεχές θερμικό μονοπάτι (thermal percolation path).

Η συμβολή της γεωμετρίας, της διάταξης και της ποιότητας των διεπιφανειών έχει αναδειχθεί από μελέτες όπως εκείνη των (Cahill et al., 2014), που έδειξε ότι η θερμική αγωγιμότητα δεν εξαρτάται μόνο από το ποσοστό του πληρωτικού ή την αγωγιμότητα των συστατικών, αλλά κυρίως από τη μικροδομή και τη διασύνδεση των φάσεων. Για την ακριβή εκτίμηση χρησιμοποιούνται τεχνικές υψηλής ευαισθησίας, όπως η θερμοανακλαστικότητα χρονικού πεδίου (TDTR), που επιτρέπει τη μέτρηση της θερμικής αντίστασης σε νανομετρική κλίμακα.

Οι εφαρμογές αυτών των γνώσεων είναι ιδιαίτερα εκτεταμένες:

- Ψύξη ηλεκτρονικών κυκλωμάτων: χρήση σύνθετων σε θερμικά pads και υλικά διεπαφής, όπου η χαμηλή διεπιφανειακή αντίσταση είναι κρίσιμη για την απομάκρυνση θερμότητας.
- Αποθήκευση ενέργειας: σε μπαταρίες και supercapacitors, τα σύνθετα με υψηλή θερμική αγωγιμότητα βελτιώνουν τη θερμική σταθερότητα και μειώνουν τον κίνδυνο θερμικής αστοχίας.
- Νανοθερμοηλεκτρικά υλικά: η ελεγχόμενη θερμική αντίσταση ενισχύει την ενεργειακή τους απόδοση.
- Αεροδιαστημικές και αμυντικές εφαρμογές: χρήση σε θερμικά προστατευτικά συστήματα όπου η ακριβής πρόβλεψη της ροής θερμότητας είναι ζωτικής σημασίας.

Συνολικά, η διεπιφανειακή θερμική αντίσταση αποτελεί το κλειδί για την κατανόηση και τον έλεγχο της θερμικής συμπεριφοράς των σύνθετων υλικών. Οι σύγχρονες θεωρητικές και πειραματικές μέθοδοι (Cahill et al., 2014), (A. J. Munnich & G. Chen, 2007) προσφέρουν τη δυνατότητα ποσοτικής εκτίμησης και μοντελοποίησης του φαινομένου, ενώ η διεπιστημονική προσέγγιση (φυσική στερεάς κατάστασης, χημεία επιφανειών, επιστήμη υλικών, θερμική μηχανική) ανοίγει τον δρόμο για τον σχεδιασμό έξυπνων σύνθετων με προσαρμοσμένη θερμική αγωγιμότητα, κατάλληλη για τις ανάγκες κάθε εφαρμογής.

## 2. Μελέτη Διεπιφάνειας Μητρικού-Πληρωτικού Υλικού

### 2.1. Εισαγωγή

Η μελέτη των σύνθετων υλικών και των διεπιφανειών που σχηματίζονται μεταξύ της μήτρας και του πληρωτικού υλικού αποτελεί θεμελιώδες αντικείμενο έρευνας στη σύγχρονη μηχανική υλικών. Η διεπιφάνεια (Shahil & Balandin, 2012), δηλαδή η περιοχή μεταξύ των δύο αυτών φάσεων, έχει ιδιαίτερη σημασία καθώς επηρεάζει καθοριστικά τις μηχανικές, θερμικές και ηλεκτρικές ιδιότητες του σύνθετου.

Η θερμική αγωγιμότητα (Cahill et al., 2014) των σύνθετων υλικών εξαρτάται όχι μόνο από τις ιδιότητες της μήτρας και του πληρωτικού υλικού, αλλά και από την ποιότητα και τα χαρακτηριστικά της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012). Η παρουσία φαινομένων όπως η θερμική αντίσταση (Kapitza resistance (Prasher, 2006)), η σκέδαση φωνονίων (phonon scattering (Kunpeng Ruan et al. 2018)) και η ασυμφωνία στην πυκνότητα καταστάσεων (DOS mismatch) μπορεί να μειώσει την απόδοση θερμικής μεταφοράς. Σε εφαρμογές όπως η θερμική διαχείριση σε ηλεκτρονικές συσκευές ή η ανάπτυξη προηγμένων θερμικών διακοπών, η κατανόηση και ο έλεγχος αυτών των φαινομένων είναι κρίσιμη.

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι να διερευνήσει σε βάθος τα χαρακτηριστικά της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012) μεταξύ μήτρας και πληρωτικού υλικού, να αποτυπώσει τις παραμέτρους που καθορίζουν το πάχος της και να αναδείξει τις μεθόδους που επιτρέπουν την τροποποίησή της. Μέσα από την ανάλυση βιβλιογραφίας και τη θεωρητική προσέγγιση, εξετάζονται περιπτώσεις υλικών όπου το πάχος της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012) κυμαίνεται από 1 έως 5 φορές το πάχος του πληρωτικού υλικού, καθώς και οι συνέπειες αυτού στην τελική θερμική αγωγιμότητα (Cahill et al., 2014).

### 2.2. Ανασκόπηση Βιβλιογραφίας

Η διεπιφάνεια μεταξύ μήτρας και πληρωτικού υλικού έχει αποτελέσει αντικείμενο εκτεταμένης μελέτης, καθώς καθορίζει σε μεγάλο βαθμό τις μηχανικές και θερμικές ιδιότητες των σύνθετων υλικών. Η διεπιφάνεια δεν είναι μια σαφώς ορισμένη γραμμή, αλλά μια ζώνη με πάχος που εξαρτάται από τη φύση των υλικών, τις διαδικασίες παρασκευής και τις συνθήκες λειτουργίας.

Σύμφωνα με πολυάριθμες πηγές, το πάχος της διεπιφάνειας (Kunpeng Ruan et al. 2018) μπορεί να κυμαίνεται από 1 έως 5 φορές το πάχος του πληρωτικού σωματιδίου ή φυλλιδίου. Αυτό το εύρος οφείλεται σε παράγοντες όπως η τραχύτητα της επιφάνειας του πληρωτικού, οι χημικές τροποποιήσεις, η παρουσία λειτουργικών ομάδων, καθώς και η θερμοκρασία και ο χρόνος κατεργασίας κατά την παραγωγή.

Μελέτες σε υλικά όπως το γραφένιο (graphene) και τα πολυστρωματικά γραφένια (Shahil & Balandin, 2012) (multilayer graphene) έχουν δείξει ότι η καλή ποιότητα διεπιφάνειας με ελάχιστα ελαττώματα μπορεί να βελτιώσει σημαντικά την θερμική αγωγιμότητα ενώ αντίθετα, η ύπαρξη ατελειών και ακαθαρσιών αυξάνει την θερμική αντίσταση (Kapitza resistance (Prasher, 2006)). Αντίστοιχα, σε οξειδίο του αλουμινίου ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) και νιτρίδιο του βορίου (BN) έχει παρατηρηθεί ότι η τροποποίηση της επιφάνειας του πληρωτικού με οργανικές ενώσεις μπορεί να αλλάξει το πάχος και τις ιδιότητες της διεπιφάνειας.

Σε υλικά όπως το καρβίδιο του πυριτίου (SiC) και τα νανοσωματίδια αργύρου

(Ag NPs), η διεπιφάνεια παίζει καθοριστικό ρόλο στη διάδοση των φωνονίων. Η σκέδαση φωνονίων (phonon scattering (Kunpeng Ruan et al. 2018)) σε αυτήν την περιοχή μπορεί να μειώσει την αποτελεσματική θερμική αγωγιμότητα (Cahill et al., 2014; Ghosh et al., 2010) του σύνθετου υλικού.

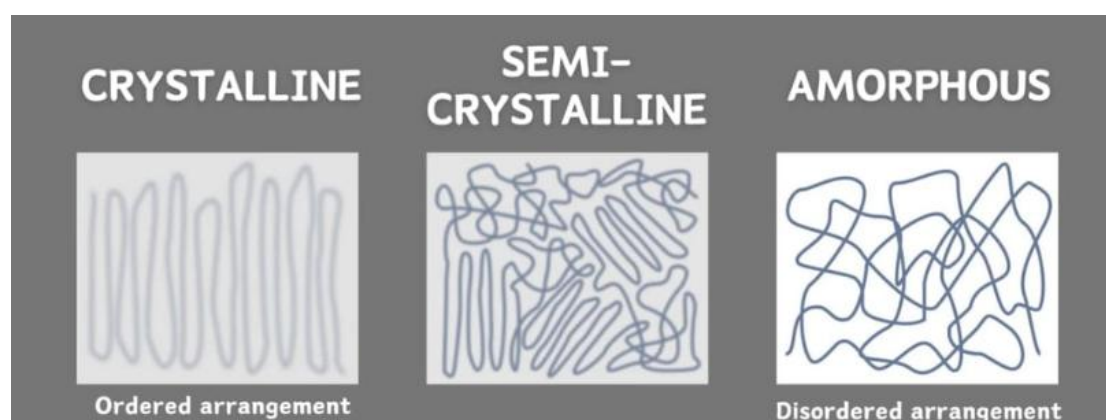
Η βιβλιογραφία αναδεικνύει ότι ο έλεγχος του πάχους της διεπιφάνειας μέσω τεχνικών όπως η χημική τροποποίηση, η χρήση συμβατών επιφανειακών επιστρώσεων, και η βελτιστοποίηση της θερμικής κατεργασίας, μπορεί να οδηγήσει σε υλικά με προσαρμοσμένες ιδιότητες θερμικής αγωγιμότητας.

### 2.3. Μορφολογία και Δομή της Διεπιφάνειας

Η μορφολογία και η δομή της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014) αποτελούν κρίσιμους παράγοντες για τον καθορισμό των ιδιοτήτων των σύνθετων υλικών, ειδικά όταν τα πληρωτικά υλικά έχουν μορφή λεπτών φυλλιδίων (flakes). Η διεπιφάνεια ορίζεται ως η ζώνη αλληλεπίδρασης μεταξύ του πληρωτικού υλικού και της μήτρας. Αυτή η περιοχή μπορεί να παρουσιάζει μικροδομή σημαντικά διαφορετική από αυτήν των επιμέρους υλικών. Αυτή η διαφοροποίηση προκύπτει λόγω φυσικοχημικών αλληλεπιδράσεων, μηχανικών παραμορφώσεων κατά την επεξεργασία και διαφορών στις θερμοδυναμικές ιδιότητες των δύο φάσεων.

Σε νανοσύνθετα υλικά με πληρωτικά υλικά σε μορφή φυλλιδίων, η μορφολογία της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014) μπορεί να είναι έντονα ανισότροπη. Αυτό σημαίνει ότι η διάταξη και ο προσανατολισμός των φυλλιδίων μπορεί να επηρεάσουν την τοπική πυκνότητα ατόμων ή μορίων, καθώς και τη φύση των δεσμών που αναπτύσσονται στην επιφάνεια. Σε περιπτώσεις όπου παρατηρείται ισχυρή πρόσφυση μεταξύ των δύο φάσεων, οι δυνάμεις Van Der Waals ή οι δεσμοί υδρογόνου συμβάλλουν στην αύξηση της συνοχής της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014).

Η δομή της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014) μπορεί να είναι αμορφική, ημι-κρυσταλλική ή πλήρως κρυσταλλική, ανάλογα με το σύστημα υλικών και τις συνθήκες παραγωγής. Η παρουσία κρυσταλλικών περιοχών στη διεπιφάνεια μπορεί να οδηγήσει σε βελτιωμένη μεταφορά θερμότητας, εφόσον η κρυσταλλική φάση παρουσιάζει υψηλή θερμική αγωγιμότητα. Ωστόσο, η ακανόνιστη δομή ή η ύπαρξη αμορφικών περιοχών μπορεί να αυξήσει τη σκέδαση φωνονίων, περιορίζοντας τη θερμική αγωγιμότητα.



**Σχήμα 2.1:** Αναπαράσταση κρυσταλλικής, ημι-κρυσταλλικής και άμορφης δομής.

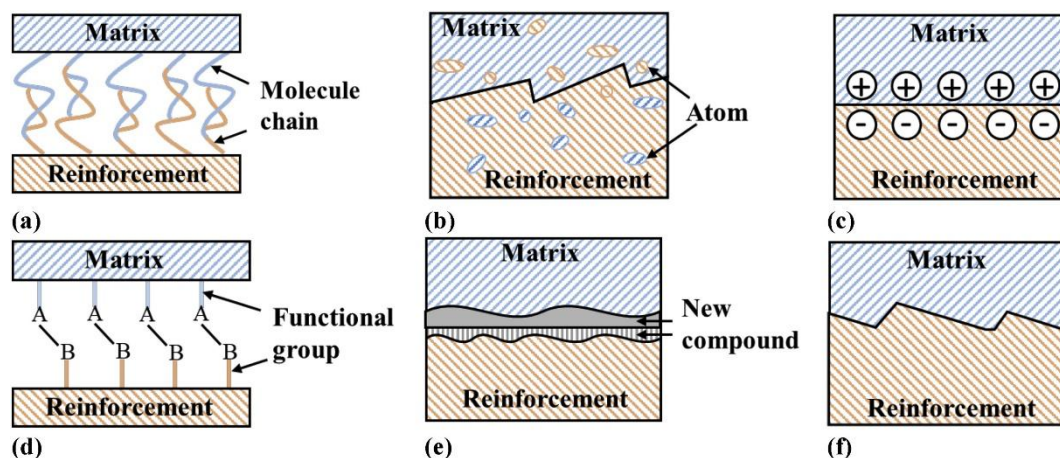
Ένα χαρακτηριστικό της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014) είναι η τάση για λεπτόκοκκη (Prasher, 2006) δομή σε σχέση με τη μήτρα ή το

πληρωτικό υλικό. Αυτή η τάση για δημιουργία λεπτόκοκκων περιοχών γίνεται όταν υπάρχει ασυμβατότητα μεταξύ πληρωτικού και μήτρας (Kunpeng Ruan et al. 2018), λόγω υψηλού ρυθμού στερεοποίησης ή έντονης μηχανικής ανάμιξης. Η μείωση του μεγέθους των κόκκων σε αυτή την περιοχή αυξάνει τον αριθμό των ορίων κόκκων, τα οποία λειτουργούν ως εμπόδια στη μεταφορά θερμότητας. Αυτό οδηγεί σε αύξηση της θερμικής αντίστασης στην περιοχή της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014). Σε εφαρμογές όπου η θερμική αγωγιμότητα είναι κρίσιμη, η λεπτόκοκκη (Prasher, 2006) μορφολογία μπορεί να είναι μειονέκτημα, ενώ σε άλλες εφαρμογές μπορεί να προσφέρει βελτιωμένη μηχανική αντοχή λόγω της περισσότερο ομοιόμορφης κατανομής τάσεων.

Η μελέτη της μορφολογίας και της δομής της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014) πραγματοποιείται με προηγμένες τεχνικές χαρακτηρισμού όπως η Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Διέλευσης (TEM) (Williams & Carter, 2009), η Μικροσκοπία Ατομικής Δύναμης (AFM) (Butt, Cappella, & Kappi, 2005), και η Φασματοσκοπία Σκέδασης Raman. Αυτές οι τεχνικές παρέχουν πληροφορίες σε νανομετρική κλίμακα, επιτρέποντας τη συσχέτιση των δομικών χαρακτηριστικών της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014) με τις μακροσκοπικές ιδιότητες του σύνθετου υλικού.

Σε σύνθετα graphene-polymer (Shahil & Balandin, 2012), η TEM απεικόνιση έχει δείξει περιοχές υψηλής κρυσταλλικότητας γύρω από τα flakes όταν χρησιμοποιούνται επιφανειακοί τροποποιητές. Σε  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -epoxy (Prasher, 2006) συστήματα, παρατηρήθηκαν εκτεταμένες αμορφικές ζώνες στη διεπιφάνεια, οι οποίες αύξησαν την θερμική αντίσταση.

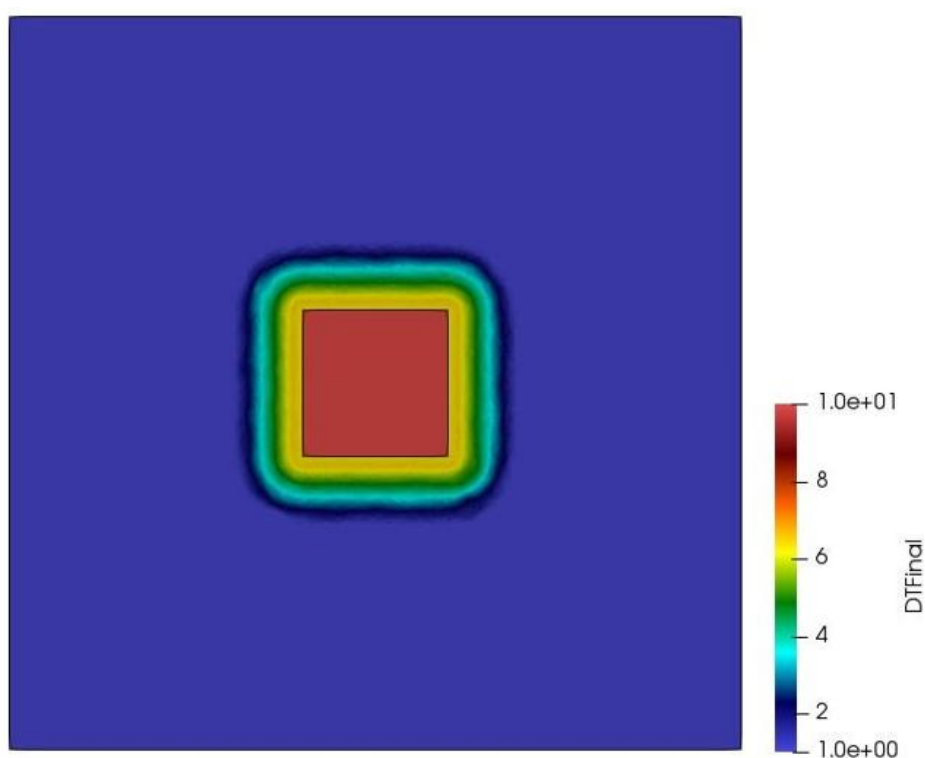
Συνολικά, η μορφολογία και η δομή της διεπιφάνειας (Shahil & Balandin, 2012; Cahill et al., 2014) καθορίζουν σε μεγάλο βαθμό την απόδοση του σύνθετου υλικού, ειδικά σε εφαρμογές που απαιτούν βελτιστοποιημένη θερμική αγωγιμότητα ή μηχανική αντοχή. Η κατανόηση αυτών των παραμέτρων αποτελεί βασικό βήμα για τον σχεδιασμό προηγμένων σύνθετων υλικών υψηλών επιδόσεων.



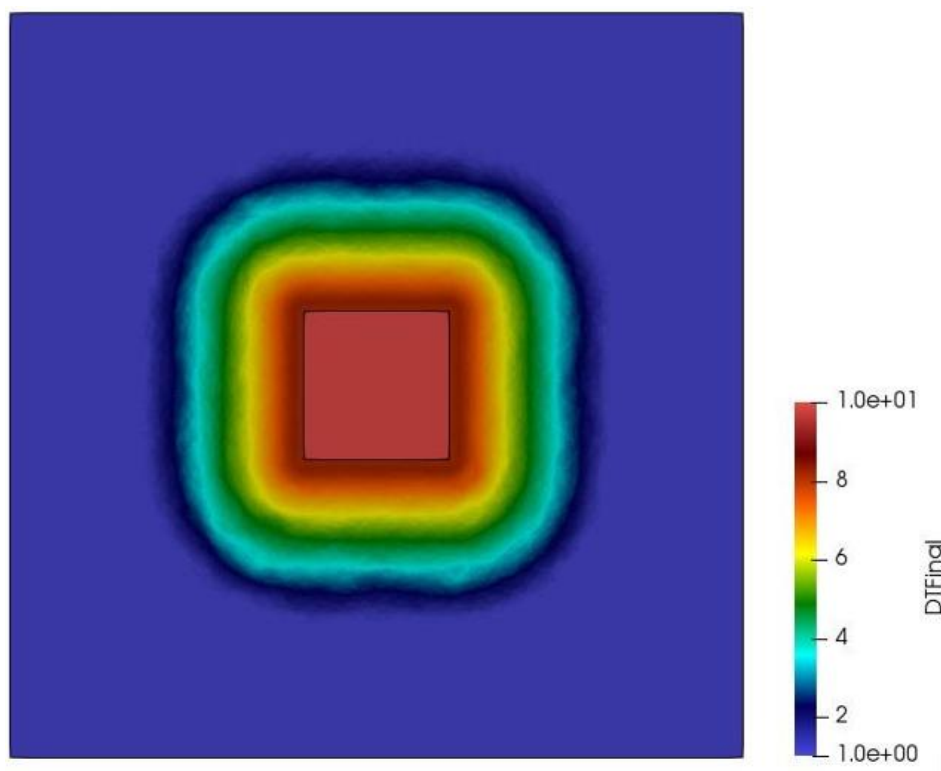
**Σχήμα 2.2:** Διασυνδεδετική πρόσφυση που σχηματίζεται από: (a) μοριακή διεμπλοκή, (b) διάχυση στοιχείων, (c) ηλεκτροστατική έλξη, (d) χημική αντίδραση μεταξύ ομάδων στην επιφάνεια του πληρωτικού υλικού και της μήτρας, (e) χημική αντίδραση που οδηγεί στον σχηματισμό νέας ένωσης, ιδιαίτερα σε σύνθετα υλικά με μεταλλική μήτρα (MMC), (f) μηχανική εμπλοκή (J.-K. Kim, Y.-W. Mai, 1998).

## 2.4. Πάχος Διεπιφάνειας και Σχέση με Πληρωτικό Υλικό

Το πάχος της διεπιφάνειας μεταξύ πληρωτικού υλικού και μητρικού υλικού αποτελεί κρίσιμη παράμετρο στην κατανόηση της θερμικής και μηχανικής συμπεριφοράς των σύνθετων υλικών. Η διεπιφάνεια λειτουργεί ως ζώνη μετάβασης μεταξύ των δύο φάσεων, όπου παρατηρείται βαθμιαία μεταβολή των ιδιοτήτων, τόσο σε επίπεδο μικροδομής όσο και σε θερμοφυσικές παραμέτρους. Στις παρακάτω εικόνες μπορούμε να δούμε σε ένα παράδειγμα από τον OpenFOAM τη διαφορά στο θερμοκρασιακό πεδίο μιας κυψελλίδας με ένα φυλλίδιο με τη διαφορά στο πάχος της διεπιφάνειας.



**Σχήμα 2.3:** Αναπαράσταση του θερμοκρασιακού πεδίου για  $N=1$ ,  $\alpha=1$ ,  $D_{flake}=10$ ,  $D_{matrix}=1$  και  $Dist=0.1$



**Σχήμα 2.4:** Αναπαράσταση του θερμοκρασιακού πεδίου για  $N=1$ ,  $\alpha=1$ ,  $D_{flake}=10$ ,  $D_{matrix}=1$  και  $Dist=0.2$

Στη βιβλιογραφία, η μέτρηση του πάχους της διεπιφάνειας γίνεται με τεχνικές όπως η Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Διέλευσης (TEM) (Williams & Carter, 2009), η Ατομική Μικροσκοπία Δύναμης (AFM) (Butt, Cappella, & Kappl, 2005) και η φασματοσκοπία XPS (Briggs & Seah, 1990). Αναφορές δείχνουν ότι το πάχος μπορεί να κυμαίνεται από μερικά νανόμετρα έως δεκάδες νανόμετρα, ανάλογα με τη φύση του πληρωτικού και τις διεργασίες επεξεργασίας. Ωστόσο, σε πιο γενικές ποσοστιαίες συσχετίσεις, έχει παρατηρηθεί ότι η διεπιφάνεια μπορεί να είναι από 1 έως και 5 φορές το πάχος (Kunpeng Ruan et al. 2018) του ίδιου του πληρωτικού υλικού, ειδικά σε περιπτώσεις νανοσωματιδίων ή φυλλιδίων με μικρό πάχος.

Αυτή η σχέση πάχους (Prasher, 2006) είναι σημαντική γιατί καθορίζει το ποσοστό όγκου του σύνθετου το οποίο καταλαμβάνει η διεπιφάνεια. Σε περιπτώσεις όπου η διεπιφάνεια έχει πάχος ίσο ή μεγαλύτερο από το πάχος του πληρωτικού, η επίδρασή της στις μακροσκοπικές ιδιότητες γίνεται κυρίαρχη. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε φαινόμενα όπως αύξηση της θερμικής αντίστασης (Kapitza resistance) (Cahill et al., 2014) λόγω σκέδασης φωνονίων, ή αντίθετα βελτίωση της μεταφοράς θερμότητας αν η διεπιφάνεια είναι κρυσταλλική και καλά συνδεδεμένη με τη μήτρα.

Η ακριβής διαμόρφωση του πάχους της διεπιφάνειας εξαρτάται από παράγοντες όπως:

- Μέγεθος και σχήμα των flakes:

Όσο μικρότερο είναι το μέγεθος των flakes, τόσο μεγαλύτερη είναι η συνολική επιφάνεια επαφής για δεδομένο όγκο πληρωτικού, οδηγώντας σε αυξημένη αναλογία διεπιφάνειας προς τον όγκο. Το πάχος της διεπιφάνειας μπορεί να είναι 1–5 φορές (Zhao, Wang, & Zhang, 2018) το πάχος του ίδιου του

πληρωτικού, ανάλογα με την επεξεργασία και το είδος του υλικού.

- Επεξεργασία και συνθήκες παραγωγής:

Η θερμοκρασία σκλήρυνσης, η πίεση και ο ρυθμός ψύξης επηρεάζουν τον ρυθμό κρυστάλλωσης και την έκταση των αμορφικών περιοχών. Υψηλοί ρυθμοί ψύξης (Han Y et al., 2015) τείνουν να αυξάνουν το πάχος της διεπιφάνειας λόγω παγίδευσης αταξίας στη δομή.

- Χημικοί τροποποιητές:

Η χρήση επιφανειακών τροποποιητών (coupling agents) μπορεί να μειώσει ή να αυξήσει το πάχος της διεπιφάνειας, ανάλογα με τον τρόπο δράσης τους. Για παράδειγμα, η χρήση σιλάνια (ενώσεις του πυριτίου) (Plueddemann, 1991) μπορούν να βελτιώσουν τη συγκόλληση και να μειώσουν τη θερμική αντίσταση, ενώ σε κάποιες περιπτώσεις προσθέτουν ενδιάμεσες ζώνες που αυξάνουν το πάχος.

Πρακτικά, είναι δυνατόν να τροποποιηθεί το πάχος της διεπιφάνειας με ελεγχόμενες διεργασίες, όπως η προσθήκη ζευγαρωτικών παραγόντων (coupling agents) που αυξάνουν τη ζώνη πρόσφυσης, ή η θερμική επεξεργασία που οδηγεί σε περαιτέρω διάχυση των ατόμων μεταξύ των δύο φάσεων. Για παράδειγμα, με κατάλληλη επιλογή συνθηκών θερμοκρασίας και πίεσης, μπορεί να επιτευχθεί πάχος διεπιφάνειας της τάξης του διπλάσιου πάχους του πληρωτικού υλικού, βελτιστοποιώντας έτσι είτε την αγωγιμότητα είτε την αντοχή.

Μπορούμε να αναφέρουμε τα παρακάτω παραδείγματα από τη βιβλιογραφία για ορισμένα σύνθετα υλικά και πώς μπορούμε να επηρεάσουμε την διεπιφάνεια αυτή. Σε σύνθετα graphene-epoxy (Shahil & Balandin, 2012), μετρήσεις TEM δείχνουν πάχος διεπιφάνειας περίπου 2–3 φορές το πάχος του flake όταν χρησιμοποιούνται επιφανειακοί ενεργοποιητές. Σε  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -polymer (Prasher, 2006) νανοσύνθετα, παρατηρήθηκε ότι η μηχανική ανάδευση υψηλής έντασης οδηγεί σε διεπιφάνειες με πάχος έως και 4 φορές το πάχος των σωματιδίων, λόγω έντονης αμορφοποίησης.

Η γνώση αυτής της σχέσης είναι καθοριστική για μοντελοποίηση σε CFD (όπως στον OpenFOAM), καθώς επιτρέπει την εκτίμηση της θερμορροής μέσω διαφορετικών περιοχών του υλικού με βάση το ποσοστό συμμετοχής της διεπιφάνειας στη συνολική διαδρομή μεταφοράς θερμότητας.

## 2.5. Ιδιότητες Διεπιφάνειας

Η διεπιφάνεια στα σύνθετα υλικά με πληρωτικό υλικό φυλλίδια δεν είναι μόνο μία γεωμετρική έννοια, αλλά μια ζώνη με ξεχωριστές φυσικοχημικές ιδιότητες, οι οποίες διαφοροποιούνται τόσο από το πληρωτικό όσο και από τη μητρική φάση. Οι ιδιότητες αυτές επηρεάζουν άμεσα την τελική απόδοση του σύνθετου υλικού.

- Θερμοφυσικές ιδιότητες:

Η θερμική αγωγιμότητα της διεπιφάνειας μπορεί να διαφέρει σημαντικά από αυτή των γειτονικών φάσεων. Η ύπαρξη ορίων κόκκων, αμορφικών περιοχών ή αλλαγών στην πυκνότητα οδηγεί σε σκέδαση φωνονίων (Shahil & Balandin, 2012) και σε αύξηση της θερμικής αντίστασης Kapitza (Cahill et al., 2014). Η επίδραση αυτή είναι εντονότερη όταν το πάχος της διεπιφάνειας είναι συγκρίσιμο ή μεγαλύτερο από το πάχος του πληρωτικού υλικού, αυξάνοντας την ποσοστιαία συμμετοχή της στο συνολικό θερμικό μονοπάτι.

- Μηχανικές ιδιότητες:

Η διεπιφάνεια μπορεί να εμφανίζει αυξημένη ή μειωμένη μηχανική αντοχή, ανάλογα με τη χημική πρόσφυση και τη μικροδομή της. Σε ορισμένες περιπτώσεις, η

λεπτόκοκκη μορφολογία (Kunpeng Ruan et al. 2018) οδηγεί σε αυξημένη σκληρότητα και καλύτερη κατανομή τάσεων. Αντίθετα, αδύναμη πρόσφυση μπορεί να οδηγήσει σε δημιουργία μικρορωγμών.

- Ηλεκτρικές ιδιότητες:

Η διεπιφάνεια μπορεί να λειτουργεί ως φραγμός ή αγωγή διόδος για ηλεκτρικά φορτία, ανάλογα με τη φύση των υλικών. Σε νανοσύνθετα με αγωγίμα πληρωτικά υλικά (π.χ. graphene), η διεπιφάνεια μπορεί να συμβάλλει στη δημιουργία συνεχών ηλεκτρικών διαδρομών ή να εμποδίζει τη ροή φορτίου αν είναι ασταθής.

Μπορούμε να δώσουμε δύο παραδείγματα στα οποία διαφορετικά πληρωτικά υλικά παρέχουν διαφορετικές ιδιότητες στην διεπιφάνεια αυτή. Σε συστήματα graphene-polymer (Shahil K. & Balandin A, 2012), η διεπιφάνεια επηρεάζει δραστικά την θερμική αγωγιμότητα. Με τη χρήση ζευγαρωτικών παραγόντων έχει παρατηρηθεί βελτίωση της πρόσφυσης και μείωση της Kapitza resistance. Σε σύνθετα  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -epoxy (Prasher, 2006), η διεπιφάνεια παίζει ρόλο στην αύξηση της μηχανικής αντοχής, αλλά η ακατάλληλη επεξεργασία οδηγεί σε αυξημένη θερμική αντίσταση.

Το συμπέρασμα των παραπάνω είναι ότι η διεπιφάνεια αποτελεί κρίσιμο στοιχείο σχεδιασμού των σύνθετων υλικών. Η κατανόηση και ο έλεγχος των ιδιοτήτων της μπορούν να οδηγήσουν σε υλικά με βελτιστοποιημένες θερμικές, μηχανικές και ηλεκτρικές επιδόσεις. Σε CFD προσομοιώσεις (όπως στον OpenFOAM), η ακριβής παράμετρος των ιδιοτήτων της διεπιφάνειας επιτρέπει πιο ρεαλιστική πρόβλεψη της θερμοροής και των μηχανικών φορτίσεων στο υλικό.

## 2.6. Θερμική Αντίσταση και Μηχανισμοί Σκέδασης στη Διεπιφάνεια

Η θερμική αντίσταση στη διεπιφάνεια, γνωστή και ως Kapitza resistance (Swartz & Pohl, 1989), αποτελεί έναν από τους πιο σημαντικούς παράγοντες που περιορίζουν τη μεταφορά θερμότητας σε σύνθετα υλικά. Η διεπιφάνεια μεταξύ πληρωτικού και μήτρας δρα ως εμπόδιο στη ροή φωνονίων, ιδιαίτερα όταν υπάρχει μεγάλη διαφορά στις μηχανικές και θερμικές ιδιότητες των δύο φάσεων.

Η αντίσταση Kapitza (Swartz & Pohl, 1989) εκφράζει την αντίσταση που παρουσιάζεται στη ροή θερμότητας όταν τα φωνόνια περνούν από ένα υλικό σε άλλο. Προκαλείται από ασυμβατότητες στις ιδιότητες των δύο υλικών, όπως η πυκνότητα, η ταχύτητα ήχου και οι φωνονικές καταστάσεις. Όσο μεγαλύτερη η ασυμβατότητα, τόσο μεγαλύτερη η αντίσταση.

Μηχανισμοί σκέδασης Φωνονίων (Phonon Scattering):

- Diffuse scattering (Chen, 2005): Τα φωνόνια αλλάζουν τυχαία κατεύθυνση κατά τη διέλευση από τη διεπιφάνεια, μειώνοντας την καθαρή μεταφορά θερμότητας.
- Specular scattering (Majumdar, 1993): Η ανακλώμενη πορεία είναι προβλέψιμη, αλλά μπορεί να περιορίσει τη ροή αν οι φωνονικές ιδιότητες δεν ταιριάζουν.
- Anharmonic scattering (Cahill et al., 2014): Προκαλείται από αλληλεπιδράσεις υψηλότερης τάξης μεταξύ φωνονίων, που αλλάζουν την ενέργεια και το μήκος κύματος τους.

DOS Mismatch:

Η ασυμφωνία στην πυκνότητα φωνονικών καταστάσεων (Density of States mismatch) μεταξύ πληρωτικού και μήτρας μειώνει την πιθανότητα μετάβασης των φωνονίων από το ένα υλικό στο άλλο. Μπορεί να συγκριθεί με τις διαφορές στις ενεργειακές στάθμες ηλεκτρονίων: αν δεν υπάρχουν διαθέσιμες καταστάσεις στην ίδια ενέργεια, η μετάβαση

δεν μπορεί να συμβεί.

Σε graphene-polymer (Shahil & Balandin, 2012) νανοσύνθετα, η Kapitza resistance (Swartz & Pohl, 1989) μπορεί να φτάσει σε τιμές που μειώνουν την θερμική αγωγιμότητα έως και 30% σε σχέση με θεωρητικές προβλέψεις. Σε Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-epoxy (Prasher, 2006), η αυξημένη αταξία στη διεπιφάνεια οδηγεί σε επιπλέον scattering και χαμηλότερη θερμική αγωγιμότητα.

Η αύξηση του πάχους της διεπιφάνειας μπορεί να αυξήσει το συνολικό σκέδαση, αλλά και να δημιουργήσει ζώνες προσαρμογής που μειώνουν την αντίσταση, ανάλογα με τη δομή. Στα λεπτόκοκκα όρια, η θερμική ροή παρουσιάζει συμπεριφορά ανάλογη με αντιστάσεις σε σειρά.

## 2.7. Τεχνικές Χαρακτηρισμού της Διεπιφάνειας

Η ακριβής μελέτη της διεπιφάνειας μεταξύ πληρωτικού και μήτρας είναι ζωτικής σημασίας για την κατανόηση των μηχανισμών που επηρεάζουν την θερμική και μηχανική συμπεριφορά ενός σύνθετου υλικού. Οι τεχνικές χαρακτηρισμού χωρίζονται σε τρεις κύριες κατηγορίες: μικροσκοπικές, φασματοσκοπικές και θερμικές.

### 1. Μικροσκοπικές Τεχνικές:

- TEM (Williams & Carter, 2009) (Transmission Electron Microscopy): Παρέχει εικόνες υψηλής ανάλυσης της δομής της διεπιφάνειας, επιτρέποντας την παρατήρηση κρυσταλλικών και αμορφικών περιοχών.
- SEM (Goldstein et al., 2018) (Scanning Electron Microscopy): Προσφέρει εικόνες μορφολογίας και τοπογραφίας, ιδανικές για τη μελέτη της κατανομής των φυλλιδίων.
- AFM (Binnig, Quate, & Gerber, 1986) (Atomic Force Microscopy): Επιτρέπει την τρισδιάστατη χαρτογράφηση της τοπογραφίας και την μέτρηση μηχανικών ιδιοτήτων σε νανοκλίμακα.

### 2. Φασματοσκοπικές Τεχνικές:

- Raman Spectroscopy (Ferrari & Basko, 2013): Ανιχνεύει αλλαγές στη δομή και την καταπόνηση μέσω μεταβολών στις Raman κορυφές. Είναι εξαιρετικά χρήσιμη για υλικά όπως το γραφένιο.
- XPS (Briggs & Seah, 1990) (X-ray Photoelectron Spectroscopy): Παρέχει πληροφορίες για τη χημική σύσταση και τους δεσμούς στη διεπιφάνεια, εντοπίζοντας επιφανειακούς τροποποιητές.

### 3. Θερμικές Τεχνικές:

- TDTR (Cahill, 2004) (Time-Domain Thermoreflectance): Μετρά την θερμική αγωγιμότητα και την Kapitza resistance με χρονική ανάλυση σε ps.
- 3-omega (3 $\omega$ ) Method (Cahill D. G., 1999): Χρησιμοποιεί περιοδική θέρμανση για τον προσδιορισμό θερμικών ιδιοτήτων λεπτών στρωμάτων.

### 4. Παραδείγματα:

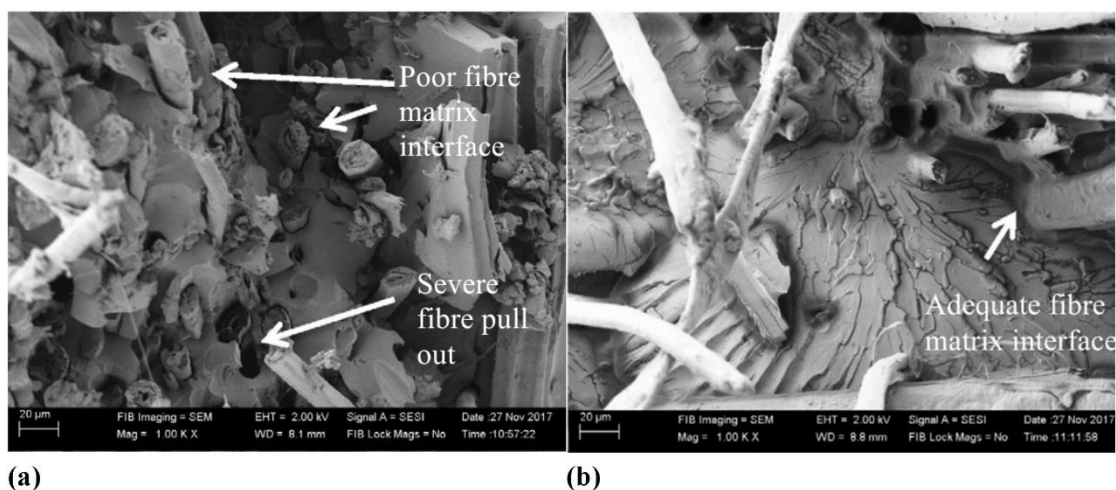
Σε σύνθετα graphene-epoxy (Shahil & Balandin, 2012), η TEM (Williams & Carter, 2009) αποκάλυψε διεπιφάνειες πάχους έως 3 φορές το πάχος του φυλλιδίου, ενώ η Raman ανίχνευσε μεταβολές στην ένταση του 2D peak, υποδεικνύοντας αλλαγές στη δομή.

## 5. Συγκριτικός Πίνακας:

| Μέθοδος                                  | Ανάλυση         | Πλεονεκτήματα       | Μειονεκτήματα                  |
|------------------------------------------|-----------------|---------------------|--------------------------------|
| TEM (Williams & Carter, 2009)            | Ατομική κλίμακα | Υψηλή ανάλυση       | Απαιτεί λεπτά δείγματα         |
| SEM (Goldstein et al., 2018)             | nm–μm           | Εύκολη προετοιμασία | Μικρότερη ανάλυση από TEM      |
| AFM (Binnig, Quate, & Gerber, 1986)      | nm              | Μη καταστροφική     | Μικρή ταχύτητα σάρωσης         |
| Raman (Ferrari & Basko, 2013)            | nm              | Ανάλυση δομής       | Περιορισμένη διείσδυση         |
| XPS (Briggs & Seah, 1990)                | nm              | Χημική ανάλυση      | Επιφανειακή τεχνική            |
| TDTR (Cahill, 2004)                      | nm–μm           | Θερμική αγωγιμότητα | Πολύπλοκη διάταξη              |
| 3-omega (3ω) Method (Cahill D. G., 1999) | μm              | Καλή ακρίβεια       | Περιορισμένη σε λεπτά στρώματα |

### Συμπεράσματα:

Η επιλογή της κατάλληλης τεχνικής εξαρτάται από το είδος του σύνθετου υλικού, τις απαιτούμενες ιδιότητες και τον διαθέσιμο εξοπλισμό. Η συνδυασμένη χρήση πολλών τεχνικών προσφέρει την πληρέστερη εικόνα της διεπιφάνειας.



**Σχήμα 2.5:** Εικόνες SEM σύνθετων υλικών εποξικής ρητίνης ενισχυμένων με ίνες με προσθήκη  $\text{TiO}_2$  (a) 0%, (b) 0.5% (V. Prasad, M.A. Joseph, K. Sekar, 2018)

## 2.8. Στρατηγικές Ελέγχου και Βελτιστοποίησης της Διεπιφάνειας

Η βελτιστοποίηση της διεπιφάνειας μεταξύ πληρωτικού και μήτρας αποτελεί κρίσιμο παράγοντα για την επίτευξη των επιθυμητών θερμικών και μηχανικών ιδιοτήτων στα σύνθετα υλικά. Οι στρατηγικές ελέγχου και βελτιστοποίησης μπορούν να διακριθούν σε χημικές, μηχανικές και θερμικές.

### 1. Χημική Τροποποίηση Επιφανειών:

Η χημική τροποποίηση της επιφάνειας των φυλλιδίων επιτρέπει τον ακριβή έλεγχο της πρόσφυσης μεταξύ μήτρας και πληρωτικού. Μέσω λειτουργικοποίησης (Kuilla et al., 2010), μπορούν να προστεθούν λειτουργικές ομάδες (π.χ. -OH, -COOH) που αυξάνουν τη διαβρεξιμότητα και μειώνουν την αντίσταση στη μεταφορά θερμότητας. Επιπλέον, επικαλύψεις με λεπτά στρώματα υλικών όπως SiO<sub>2</sub> (Pérez-Bustamante et al., 2014), Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (X. Wang et al., 2021) ή πολυμερή μπορούν να βελτιώσουν τη χημική συμβατότητα και να επιτρέψουν τον έλεγχο του πάχους της διεπιφάνειας.

### 2. Μηχανικές Τεχνικές:

Οι μηχανικές τεχνικές περιλαμβάνουν μεθόδους όπως το hot pressing (που συνδυάζει πίεση και θερμότητα για να μειώσει τα κενά και να αυξήσει την πυκνότητα, και το shear mixing (Kim et al., 2010), που βελτιώνει την ομοιογενή κατανομή και τον προσανατολισμό των φυλλιδίων, επηρεάζοντας έμμεσα το πάχος της διεπιφάνειας. Η ομοιόμορφη κατανομή των πληρωτικών υλικών περιορίζει τη δημιουργία περιοχών με υπερβολικό ή ανεπαρκές πάχος διεπιφάνειας.

### 3. Θερμικές Κατεργασίες:

Η θερμική κατεργασία μπορεί να αλλάξει τη μικροδομή της διεπιφάνειας και να βελτιώσει τις θερμικές ιδιότητες. Η ανόπτηση (annealing (Gogotsi & Presser, 2013)) βοηθά στην αναδιάταξη των ατόμων και στην αύξηση της κρυσταλλικότητας, μειώνοντας την Kapitza resistance. Η ελεγχόμενη ψύξη (controlled cooling (Ferry, 2001)) επηρεάζει τη διαμόρφωση των κόκκων και το τελικό πάχος της διεπιφάνειας.

### 4. Παραδείγματα Βιβλιογραφίας:

- Σε νανοσύνθετα graphene-epoxy (Shahil & Balandin, 2012), η χρήση functionalized graphene αύξησε την θερμική αγωγιμότητα κατά 25% λόγω μείωσης της θερμικής αντίστασης στην διεπιφάνεια.
- Σε σύνθετα Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (X. Wang et al., 2021)-polymer (Mittal, 2011), η ανόπτηση στους 200°C για 2 ώρες οδήγησε σε μείωση πάχους διεπιφάνειας από 3 φορές σε 1,5 φορές το πάχος του πληρωτικού.

### 5. Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα:

Οι χημικές τεχνικές προσφέρουν ακρίβεια, αλλά αυξάνουν το κόστος και την πολυπλοκότητα παραγωγής. Οι μηχανικές τεχνικές είναι απλούστερες αλλά με περιορισμένο έλεγχο, ενώ οι θερμικές κατεργασίες είναι αποτελεσματικές στη βελτίωση της μικροδομής, αλλά μπορεί να μειώσουν την αντοχή της μήτρας.

### Συμπεράσματα:

Η βελτιστοποίηση της διεπιφάνειας είναι πολυπαραγοντικό ζήτημα και συχνά απαιτεί

τον συνδυασμό διαφορετικών μεθόδων για την επίτευξη του επιθυμητού πάχους και των βέλτιστων ιδιοτήτων.

## 2.9. Συμπεράσματα και Μελλοντικές Προοπτικές

Η παρούσα εργασία ανέδειξε την καθοριστική σημασία της διεπιφάνειας μεταξύ πληρωτικού υλικού και μήτρας στην απόδοση των σύνθετων υλικών, ιδίως όσον αφορά τις θερμικές τους ιδιότητες. Η διεπιφάνεια δεν είναι απλώς μια γεωμετρική έννοια, αλλά ένας δυναμικός χώρος όπου η μικροδομή, η κρυσταλλικότητα και οι χημικές αλληλεπιδράσεις καθορίζουν την αγωγιμότητα θερμότητας και την αντοχή του υλικού.

Από τη βιβλιογραφία προκύπτει ότι το πάχος της διεπιφάνειας μπορεί να κυμαίνεται από 1 έως και 5 φορές (Mortazavi & Rabczuk, 2015) το πάχος του πληρωτικού, με τις ιδιότητες της περιοχής αυτής να επηρεάζονται από παραμέτρους όπως η επιφανειακή τροποποίηση του πληρωτικού, η διαδικασία παρασκευής και οι θερμικές κατεργασίες. Οι λεπτόκοκκες δομές και η πιθανή μεταβολή του προσανατολισμού των κρυσταλλιτών σε αυτήν την περιοχή οδηγούν σε φαινόμενα όπως η αύξηση της θερμικής αντίστασης (Kapitza resistance (Swartz & Pohl, 1989)) ή η δημιουργία θερμογεφυρών (Yu Wang et al., 2016).

Οι πειραματικές τεχνικές που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη μέτρηση και τον έλεγχο του πάχους της διεπιφάνειας περιλαμβάνουν μικροσκοπικές μεθόδους υψηλής ανάλυσης (TEM (Williams & Carter, 2009), AFM (Binnig, Quate, & Gerber, 1986)), φασματοσκοπικές τεχνικές (Raman (Ferrari & Basko, 2013), FTIR (Smith, 2011)) και θερμικές μετρήσεις (laser flash analysis (Cape & Lehman, 1963)). Ο συνδυασμός αυτών των μεθόδων επιτρέπει τόσο την ποσοτική εκτίμηση όσο και την ποιοτική κατανόηση των διεπιφανειακών φαινομένων.

Μελλοντικά, η έρευνα θα πρέπει να επικεντρωθεί σε:

- Την ανάπτυξη νέων τεχνικών επιφανειακής τροποποίησης που επιτρέπουν ακριβή έλεγχο του πάχους διεπιφάνειας.
- Τη χρήση πολυκλιμακωτών μοντέλων (multiscale modeling (Ostoja-Starzewski, 2006)) για την πρόβλεψη της επίδρασης της διεπιφάνειας στις μακροσκοπικές ιδιότητες.
- Τη διερεύνηση συνδυαστικών στρατηγικών, όπως η ταυτόχρονη χημική και θερμική κατεργασία.

Συνοψίζοντας, η διεπιφάνεια αποτελεί κεντρικό παράγοντα στην μηχανική των σύνθετων υλικών. Ο έλεγχος του πάχους και των ιδιοτήτων της δεν είναι μόνο θέμα ακαδημαϊκού ενδιαφέροντος, αλλά και κρίσιμος παράγοντας για την ανάπτυξη προηγμένων υλικών υψηλών επιδόσεων στις εφαρμογές θερμικής διαχείρισης.

## 3. Ανάλυση του Υπολογιστικού Μοντέλου

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζονται τα υπολογιστικά εργαλεία που αξιοποιήθηκαν για την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας. Περιγράφεται αναλυτικά η διαδικασία δημιουργίας του υπολογιστικού μοντέλου, τα στάδια επίλυσης καθώς και η επεξεργασία και απεικόνιση των αποτελεσμάτων.

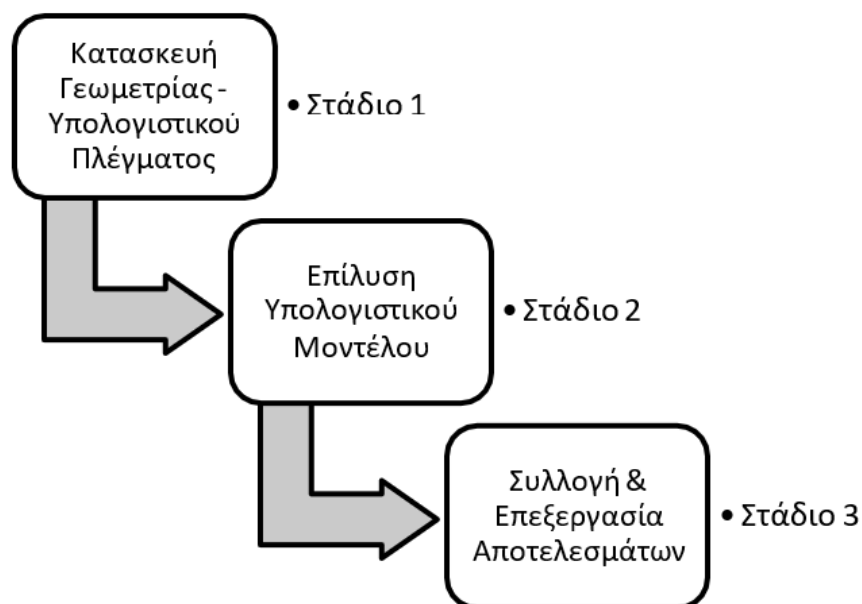
Συγκεκριμένα, για την κατασκευή της γεωμετρίας χρησιμοποιήθηκαν τα λογισμικά **Autopilot** (A.Tsiantis, 2020) και **Gmsh** (C. Geuzaine & J. F. Remacle, 2007),

ενώ η αριθμητική προσομοίωση πραγματοποιήθηκε μέσω του πακέτου ανοικτού κώδικα **OpenFOAM**. Για τη μετεπεξεργασία και την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό **ParaView**, το οποίο αποτελεί αναπόσπαστο εργαλείο του OpenFOAM.

Η εκτέλεση των υπολογιστικών αναλύσεων πραγματοποιήθηκε στο **cluster** του Εργαστηρίου Ρευστομηχανικής και Στροβιλομηχανών του Τμήματος.

### 3.1 Δημιουργία Υπολογιστικού Μοντέλου

Η διαδικασία ανάπτυξης και επίλυσης του υπολογιστικού μοντέλου περιλαμβάνει τρία βασικά στάδια. Στο πρώτο στάδιο πραγματοποιείται η δημιουργία της γεωμετρίας με το λογισμικό Autopilot και στη συνέχεια η παραγωγή του υπολογιστικού πλέγματος μέσω της εφαρμογής Gmsh. Στο δεύτερο στάδιο, ακολουθεί η επίλυση του προβλήματος με το λογισμικό OpenFOAM, όπου εισάγονται οι απαιτούμενες αρχικές και οριακές συνθήκες. Τέλος, στο τρίτο στάδιο, πραγματοποιείται η συλλογή, ανάλυση και επεξεργασία των αποτελεσμάτων.



*Σχήμα 3.1: Διαδικασία επίλυσης υπολογιστικού μοντέλου, χωρισμένη στα επιμέρους στάδια.*

### 3.2 Κατασκευή Γεωμετρίας - Υπολογιστικού Πλέγματος

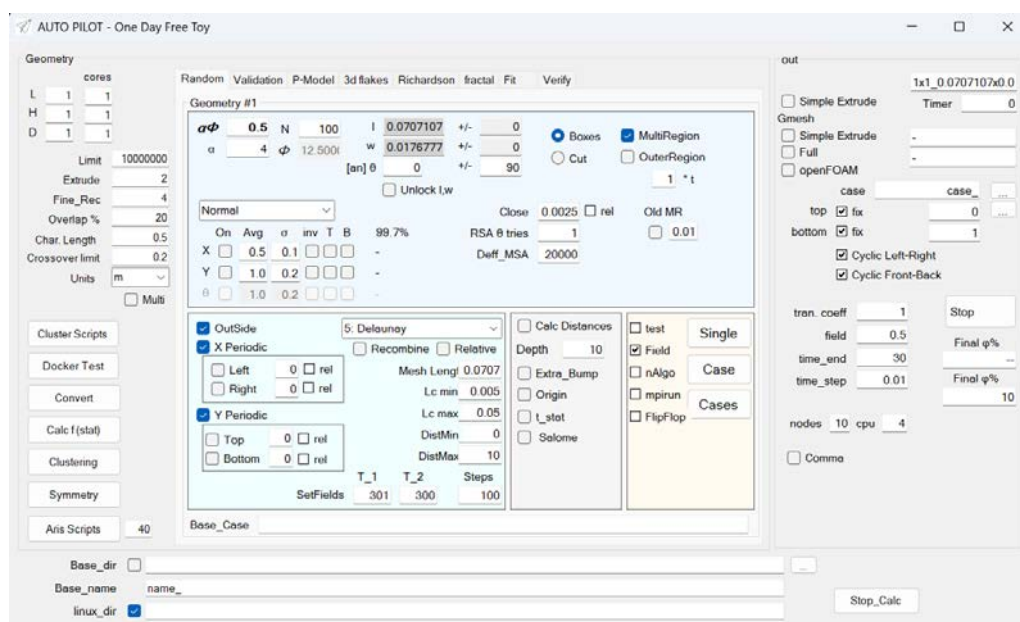
#### 3.2.1 Autopilot

Το λογισμικό Autopilot έχει δημιουργηθεί από το κ.Τσιαντή Ανδρέα στα πλαίσια της διπλωματικής του εργασίας (Α.Τσιαντίς, 2020).

Πιο συγκεκριμένα, το πρόγραμμα AutoPilot, μπορεί να:

- 1) Κατασκευάζει γεωμετρίες σύνθετων υλικών ενισχυμένα με φυλλίδια

- 2) Παράγει αρχεία πλεγμάτων το GMSH
- 3) Παράγει τα απαιτούμενα scripts για τον υπολογισμό πλεγμάτων από το Salome στο περιβάλλον του cluster του εργαστηρίου
- 4) Παράγει τα απαιτούμενα scripts για τη μετατροπή των πλεγμάτων από το βοηθητικό πρόγραμμα του OpenFOAM ideasUnvToFoam
- 5) Παράγει τα αρχεία των αρχικών και συνοριακών συνθηκών για τον OpenFOAM
- 6) Παράγει τα απαιτούμενα αρχεία για την εκτέλεση των υπολογισμών από το cluster
- 7) Παράγει τα απαιτούμενα αρχεία και scripts που περιέχουν τις χρονικές παραμέτρους που θα χρειαστούμε ανάλογα με την περίπτωση μικροδομής
- 8) Παράγει τα απαιτούμενα αρχεία μακροεντολών για τον υπολογισμό των μεταβλητών πεδίου από το ParaView.
- 9) Διαβάζει τα παραγόμενα αρχεία από το ParaView Και τα εξάγει για να γίνει χρήση τους από το Microsoft Excel ή από το OriginLab



Σχήμα 3.2: Το γραφικό περιβάλλον της εφαρμογής Autopilot.

### 3.2.2 Gmsh – Υπολογιστικό Πλέγμα

Το Gmsh είναι ένα ελεύθερο (open-source) λογισμικό για δημιουργία και επεξεργασία πλεγμάτων (mesh generation), το οποίο χρησιμοποιείται κυρίως σε εφαρμογές υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD) και μεθόδων πεπερασμένων στοιχείων (FEM).

Κύρια χαρακτηριστικά:

- Δημιουργεί διδιάστατα (2D) και τρισδιάστατα (3D) πλέγματα από γεωμετρικά μοντέλα.
- Διαθέτει ενσωματωμένο CAD kernel για να φτιάχνει γεωμετρίες από την αρχή.
- Υποστηρίζει εισαγωγή/εξαγωγή σε πολλά μορμάτ (π.χ. .geo, .msh, .stl).

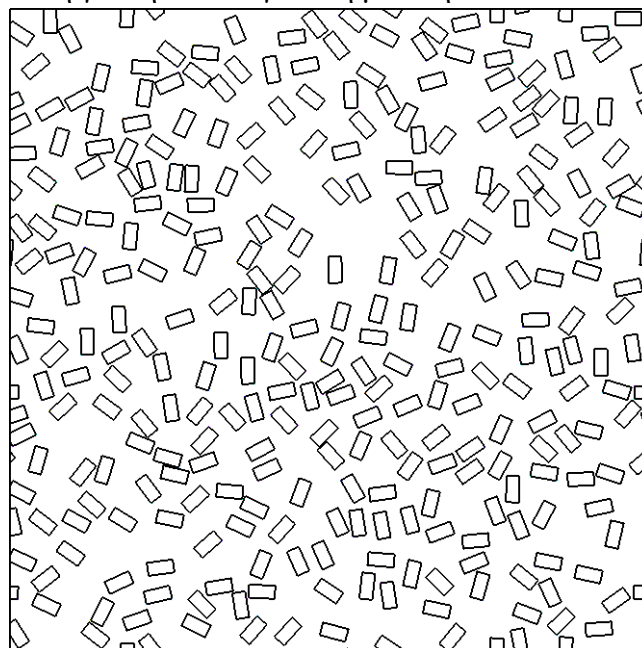
- Έχει γλώσσα scripting ώστε να μπορείς να αυτοματοποιήσεις διαδικασίες και να φτιάξεις παραμετρικά μοντέλα.
- Περιλαμβάνει οπτικοποίηση (visualization) για να δεις πλέγματα ή αποτελέσματα προσομοιώσεων.
- Χρησιμοποιείται συχνά σε συνδυασμό με προγράμματα ανάλυσης όπως OpenFOAM, Elmer, Code\_Aster, CalculiX κ.ά.

Για το Gmsh πρέπει επιπλέον να αναφέρουμε ότι παρέχει επιλογές σχετικά με τα κελιά του πλέγματος. Αυτά μπορεί να είναι γραμμικά, τριγωνικά, τετραεδρικά και πρισματικά. Στην παρούσα εργασία έγινε χρήση της μεθόδου De – Launay η οποία παράγει πρισματικά κελιά.

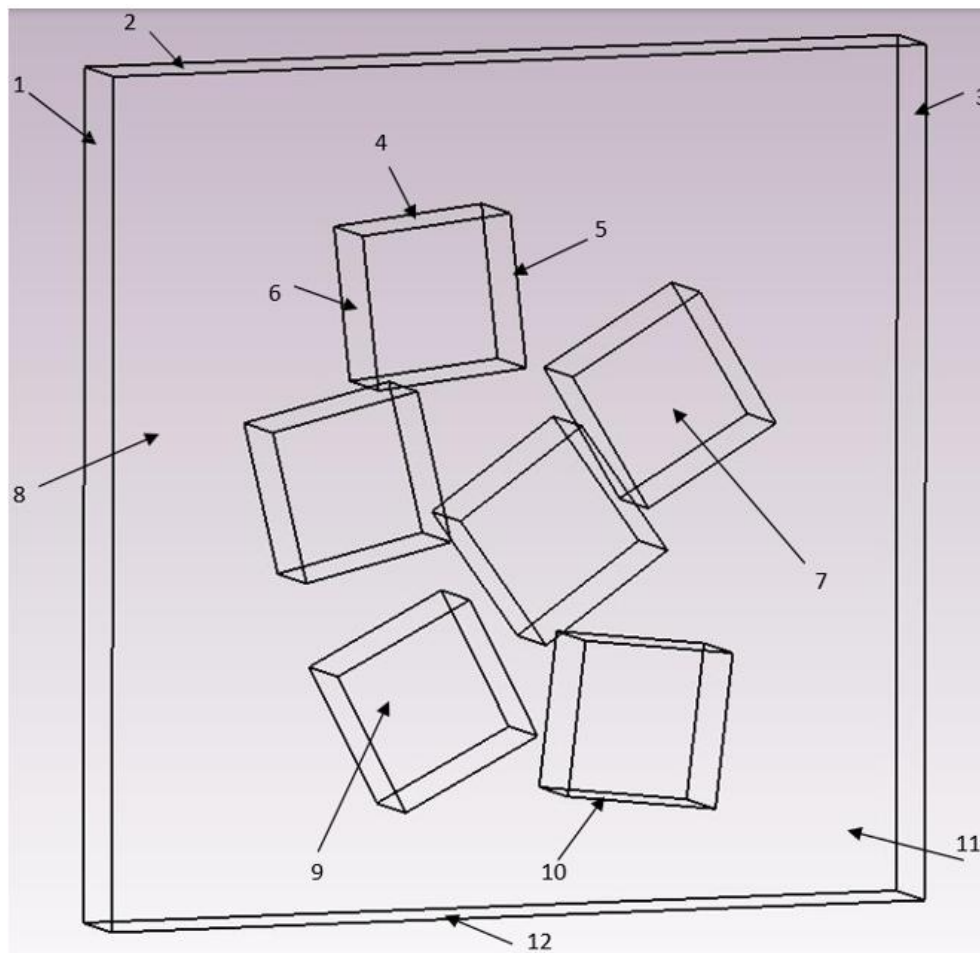
Για την παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε ως μητρικό υλικό, ένα δυσδιάστατο ορθογώνιο διαστάσεων  $1 \times 1$  (m) ενισχυμένο με φυλλίδια με λόγο διαστάσεων  $\alpha$ . Το πρόγραμμα Autopilot κανονίζει τυχαία τα φυλλίδια μέσα στο μητρικό υλικό με συγκεκριμένη διασπορά και φροντίζει να μην υπάρχει επαφή μεταξύ τους. Επιπροσθέτως, στο πρόγραμμα Autopilot, ο χρήστης μπορεί να εισάγει τις παρακάτω πληροφορίες και να τροποποιήσει με αυτό τον τρόπο το ίδιο το σύνθετο υλικό ώστε να μελετήσει διαφορετικές περιπτώσεις.

- Το πλήθος των φυλλιδίων  $N$
- Το λόγο πλήρωσης του υλικού  $\alpha\phi$
- Τον προσανατολισμό των φυλλιδίων  $\theta$
- Το εύρος τυχαίου προσανατολισμού των φυλλιδίων  $\varepsilon$
- Τη διασπορά των φυλλιδίων στο μήκος της μήτρας  $\sigma$

Καθώς στην περίπτωση μας μελετάμε τη διεπιφάνεια μεταξύ μητρικού και πληρωτικού υλικού, πρέπει το σύνθετο υλικό να χωριστεί σε δύο διακριτές ζώνες, τη ζώνη του μητρικού υλικού (matrix zone) και τη ζώνη του πληρωτικού υλικού (flake zone). Στο παρακάτω σχήμα υπάρχει αναλυτική περιγραφή των υποπεριοχών ώστε να εφαρμοστούν οι απαραίτητες συνοριακές συνθήκες. Πρέπει ακόμα να αναφέρουμε ότι γίνεται λεπτομερή διακριτοποίηση για την περιοχή της διεπαφής μήτρας και φυλλιδίων καθώς είναι σημαντική για την υπολογιστική μελέτη.



**Σχήμα 3.3:** Ενδεικτική γεωμετρία υπολογιστικού μοντέλου με  $\alpha=2$ ,  $N=100$ ,  $\theta=0$  και  $\varepsilon=90$ .



**Σχήμα 3.4** Ονομασία επιφανειών υπολογιστικού μοντέλου: 1) *left matrix*, 2) *top matrix*, 3) *right matrix*, 4) *top flake*, 5) *right flake*, 6) *left flake*, 7) *front flake*, 8) *front matrix*, 9) *back flake*, 10) *bottom flake*, 11) *back matrix*, 12) *bottom matrix*.

### 3.3 Κατασκευή Γεωμετρίας - Υπολογιστικού Πλέγματος

Παρακάτω θα γίνει ανάλυση της διαδικασίας για την επίλυση του υπολογιστικού μοντέλου στο λογισμικό Openfoam.

#### 3.3.1 OpenFoam

Το OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) είναι ένα ελεύθερο και ανοιχτού κώδικα λογισμικό για Υπολογιστική Ρευστοδυναμική (CFD – Computational Fluid Dynamics). Χρησιμοποιείται για προσομοιώσεις ροής ρευστών, μεταφοράς θερμότητας, χημικών αντιδράσεων, στροβιλώδους ροής, ακόμα και για συζευγμένες πολυφυσικές αναλύσεις. Αναπτύσσεται σε C++ και προσφέρει μεγάλη ευελιξία, αφού μπορείς να επεκτείνεις τον κώδικά του ή να δημιουργήσεις δικά σου μοντέλα.

Το Ubuntu θεωρείται το πιο φιλικό λειτουργικό για το OpenFOAM, γιατί:

- Υπάρχουν έτοιμα πακέτα εγκατάστασης (deb packages) και επίσημα repos.

- Παρέχεται άμεσα υποστήριξη για παράλληλη εκτέλεση με MPI.
- Συχνά συνδυάζεται με εργαλεία όπως:
- Gmsh ή Salome για δημιουργία γεωμετρίας/πλέγματος.
- ParaView για οπτικοποίηση αποτελεσμάτων.

Η βασική ροή εργασίας είναι:

1. Δημιουργία γεωμετρίας και πλέγματος.
2. Ορισμός συνόρων, φυσικών ιδιοτήτων και αριθμητικών παραμέτρων.
3. Επιλογή κατάλληλου "solver" (π.χ. simpleFoam, interFoam, pisoFoam).
4. Εκτέλεση της προσομοίωσης.
5. Οπτικοποίηση με ParaView.

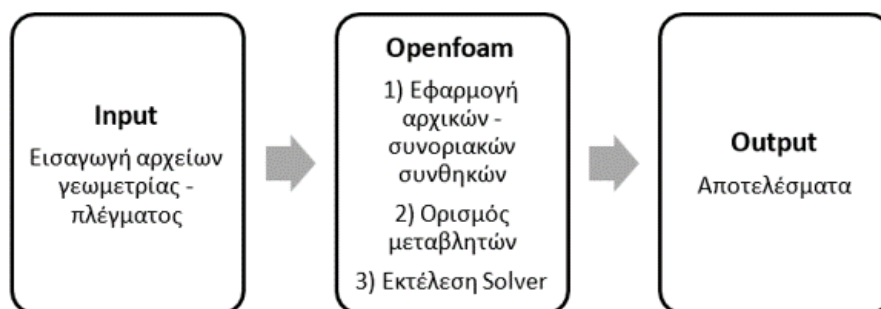
Η αριθμητική μεθοδολογία του βασίζεται στη Μέθοδο Πεπερασμένων Όγκων (Finite Volume Method, FVM), η οποία επιτρέπει τη διακριτοποίηση και επίλυση των διαφορικών εξισώσεων που διέπουν τα ρευστοδυναμικά και θερμοδυναμικά μοντέλα.

Μία από τις βασικές ιδιαιτερότητες του λογισμικού είναι η παραμετρική ρύθμιση μέσω αρχείων κειμένου (input files) και όχι μέσω γραφικής διεπαφής. Η προσέγγιση αυτή, αν και αρχικά δυσκολεύει τον νέο χρήστη, παρέχει μεγαλύτερη ελευθερία, δυνατότητα αυτοματοποίησης και επεκτασιμότητας των προσομοιώσεων. Ο χρήστης διαμορφώνει τη γεωμετρία και το υπολογιστικό πλέγμα (meshing), τις αρχικές και συνοριακές συνθήκες, καθώς και τα μοντέλα στροβιλώδους ροής, καύσης ή πολυφασικής ροής μέσα από φακέλους και αρχεία εισόδου.

Συγκεκριμένα, κάθε υπολογιστικό μοντέλο (case) στο OpenFOAM αποτελείται από:

- τον φάκελο 0, όπου ορίζονται οι αρχικές και οριακές συνθήκες για τη χρονική στιγμή  $t = 0$ ,
- τον φάκελο constant, που περιλαμβάνει τις φυσικές ιδιότητες και τις παραμέτρους του μοντέλου,
- τον φάκελο system, όπου ορίζονται τα αριθμητικά σχήματα και οι παράμετροι ελέγχου της προσομοίωσης,
- καθώς και το υπολογιστικό πλέγμα και τα αρχεία αυτοματοποίησης (π.χ. a.sh).

Αφού ολοκληρωθεί η διαδικασία δημιουργίας γεωμετρίας, παραγωγής πλέγματος και καθορισμού συνθηκών, επιλέγεται ο κατάλληλος solver για την επίλυση των εξισώσεων και την εξαγωγή των αποτελεσμάτων. Στην παρούσα μελέτη, χρησιμοποιήθηκε η έκδοση OpenFOAM v9, η οποία ήταν πλήρως συμβατή με το υπολογιστικό σύστημα του Εργαστηρίου Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών.



**Σχήμα 3.5:** Ροή των εργασιών του Openfoam για την επίλυση προσομοίωσης.

### 3.3.2 Μέθοδος Πεπερασμένων Όγκων (FVM)

Η Μέθοδος Πεπερασμένων Όγκων (Finite Volume Method – FVM) είναι μια αριθμητική μέθοδος διακριτοποίησης που χρησιμοποιείται για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDEs), ιδιαίτερα αυτών που εμφανίζονται σε προβλήματα ρευστομηχανικής, θερμοδυναμικής και μεταφοράς μάζας/ενέργειας.

#### Βασική ιδέα

Η FVM χωρίζει τον χώρο σε μικρούς ελεγχόμενους όγκους (control volumes) γύρω από κάθε σημείο του πλέγματος. Στη συνέχεια:

- Οι διαφορικές εξισώσεις ολοκληρώνονται σε κάθε όγκο ελέγχου.
- Εφαρμόζεται το Θεώρημα Απόκλισης (Gauss divergence theorem) ώστε οι όροι ροής να μετατραπούν σε ολοκληρώματα ροής στις επιφάνειες του όγκου.
- Έτσι, αντί να λύνουμε τις εξισώσεις σημειακά (όπως στη Μέθοδο Πεπερασμένων Διαφορών), λύνουμε με βάση τη διατήρηση ποσότητας (mass, momentum, energy) σε κάθε στοιχειώδη όγκο.

Αυτό εξασφαλίζει ότι οι θεμελιώδεις αρχές διατήρησης τηρούνται ακριβώς σε κάθε όγκο ελέγχου, κάτι που κάνει τη μέθοδο ιδιαίτερα αξιόπιστη για φυσικά συστήματα.

#### Πλεονεκτήματα της FVM

- Διατήρηση φυσικών νόμων: εγγυάται ακριβή διατήρηση μάζας, ορμής και ενέργειας σε κάθε όγκο.
- Ευελιξία στα πλέγματα: μπορεί να εφαρμοστεί σε πολύπλοκες γεωμετρίες με ανομοιόμορφα ή μη δομημένα πλέγματα (structured/unstructured meshes).
- Ευρεία χρήση στη CFD: είναι η πιο διαδεδομένη μέθοδος σε λογισμικά όπως το OpenFOAM, το Fluent και το STAR-CCM+.
- Καλή ισορροπία μεταξύ ακρίβειας και υπολογιστικού κόστους.

#### Διαδικασία (απλοποιημένα βήματα):

1. Διακριτοποίηση χώρου → Χωρίζουμε τον υπολογιστικό τομέα σε control volumes γύρω από τα κέντρα πλέγματος.
2. Ολοκλήρωση εξίσωσης → Κάθε PDE ολοκληρώνεται στον όγκο ελέγχου.
3. Εφαρμογή Θεωρήματος Απόκλισης → Μετατροπή των χωρικών παραγώγων σε ροές μέσα από τις επιφάνειες.
4. Προσεγγίσεις ροής (flux approximations) → Υπολογισμός των ροών στις επιφάνειες με σχήματα διαφορών (upwind, central differencing, QUICK κ.ά.).
5. Συναρμολόγηση συστήματος εξισώσεων → Προκύπτει ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων που επιλύεται αριθμητικά.

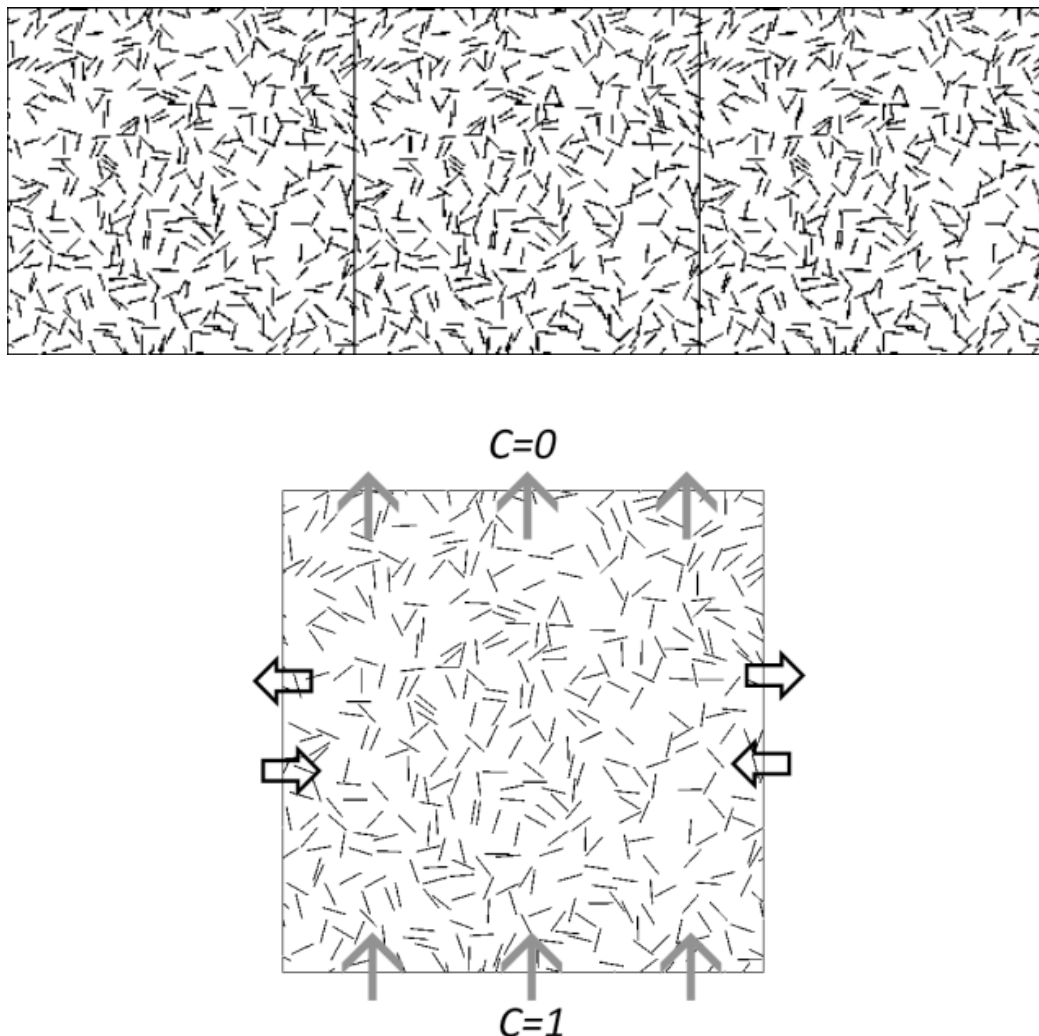
#### Ενδεικτικές εφαρμογές:

- Προσομοίωση ροής ρευστών σε αγωγούς, μηχανές, αεροδυναμικές επιφάνειες.
- Μελέτη μεταφοράς θερμότητας και καύσης.
- Πολυφασικές ροές (νερό-αέρα, φυσαλίδες, σωματίδια).
- Προβλήματα ακουστικής, αεροδυναμικής και κλιματολογίας.

### 3.3.3 Αρχικές και Συνοριακές Συνθήκες

Οι περιπτώσεις που μελετάμε στην παρούσα εργασία αφορά δισδιάστατη μεταφορά θερμότητας προς μία διεύθυνση χωρίς παραγωγή ενέργειας και υπό σταθερές συνθήκες. Θεωρούμε διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ άνω και κάτω επιφάνειας του σύνθετου υλικού  $\Delta T=1K$  συνεπώς το  $T_{Bottom}=301K$  και  $T_{top}=300K$ .

Η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε στο σύνολο των προσομοιώσεων της παρούσης εργασίας είναι δισδιάστατη με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στη δεξιά και στην αριστερή πλευρά της μήτρας και των φυλλιδίων. Η επιλογή αυτή στον Openfoam γίνεται με τη συνθήκη cyclicAMI. Επειδή ο Openfoam μπορεί να λύσει τρισδιάστατες γεωμετρίες πρέπει να λάβουμε τις οριακές συνθήκες empty για τις περιοχές εμπρός και πίσω της κυψελίδας. Μια τυπική γεωμετρία φαίνεται στο παρακάτω σχήμα όπου φαίνεται η εφαρμογή και η περιοδικότητα των συνοριακών συνθηκών.



Σχήμα.3.6 - Τυπική περιοδική γεωμετρία

Τέλος, όσον αναφορά τη διεπιφάνεια των δύο υλικών, έχει γίνει ειδική δουλειά στον solver που αναπτύχθηκε κατά τη διπλωματική εργασία του κ.Αποστόλου «Μελέτη επίδρασης του σχηματισμού θερμογεφυρών στην θερμική αγωγιμότητα

σύνθετων υλικών, 2025», ώστε να ορίζει την θερμοκρασιακή βαθμίδα με μηδενική τιμή με την επιλογή zeroGradient.

Οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες του προβλήματος είναι σε ένα μεγάλο βαθμό ίδιες με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στην διπλωματική εργασία του κ. Γαϊτάνη Ν.

### 3.4 Επεξεργασία Αποτελεσμάτων

Μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας επίλυσης μιας προσομοίωσης, παράγονται τα απαραίτητα αρχεία εξόδου που περιέχουν τις υπολογισμένες μεταβλητές. Στην παρούσα εργασία, κύρια ενδιαφέροντα αποτελούν η θερμική αγωγιμότητα και το θερμοκρασιακό πεδίο του σύνθετου υλικού, καθώς και ορισμένες επιπλέον μεταβλητές που συμβάλλουν στην εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων.

Για την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων χρησιμοποιείται το Paraview, εργαλείο ενσωματωμένο στο OpenFOAM, το οποίο επιτρέπει την παραγωγή εικόνων και γραφημάτων μέσω κατάλληλων εντολών. Επιπλέον, με την αξιοποίηση ειδικών ορισμάτων στο αρχείο a.sh, υπολογίζεται η θερμική ροή σε επιλεγμένες επιφάνειες της γεωμετρίας. Τα δεδομένα αυτά στη συνέχεια επεξεργάζονται και απεικονίζονται με τη βοήθεια του λογισμικού Origin, το οποίο χρησιμοποιείται για την κατασκευή γραφημάτων και την περαιτέρω ανάλυση.

## 4. Αποτελέσματα Υπολογιστικής Μελέτης

Οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν σε ένα δισδιάστατο κελί αναφοράς (Representative Volume Element – RVE) ορθογωνίου σχήματος. Η γεωμετρία δημιουργήθηκε με την τοποθέτηση 500 φυλλιδίων μέσω αλγόριθμου τυχαίας κατανομής. Οι συντεταγμένες των κέντρων των φυλλιδίων στο επίπεδο παράγονται από γεννήτρια τυχαίων αριθμών, ενώ η γωνία προσανατολισμού ( $\theta$ ) είναι σταθερή και κοινή για όλα τα φυλλίδια.

Ο αλγόριθμος ελέγχει για πιθανή επικάλυψη κάθε νέου φυλλιδίου με τα ήδη τοποθετημένα, σε μια υπο-περιοχή γύρω από το κέντρο του προηγούμενου. Αν δεν υπάρχει αλληλοεπικάλυψη, το νέο φυλλίδιο εισάγεται στη γεωμετρία· η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι να τοποθετηθεί ο συνολικός αριθμός φυλλιδίων που έχει οριστεί. Εάν μετά από  $10^5$  προσπάθειες δεν είναι δυνατή η τοποθέτηση νέου φυλλιδίου, ο αλγόριθμος τερματίζει και ξεκινά από την αρχή.

Για να είναι δυνατή η δημιουργία πλέγματος, επιβάλλεται ελάχιστη απόσταση  $2t$  μεταξύ των φυλλιδίων (όπου  $t$  θεωρείται το ιδεατό πάχος τους). Αν το RVE έχει διαστάσεις  $H$  και  $L$ , περιλαμβάνει  $N$  φυλλίδια με διαστάσεις  $(t, l)$ , τότε το κλάσμα εμβαδού των φυλλιδίων ορίζεται ως:

$$\varphi = \frac{Nat^2}{LH}$$

και το μήκος  $l$  τους υπολογίζεται από:

$$l = \sqrt{LH(\alpha\varphi)/N}$$

Για τη μελέτη εφαρμόστηκαν περιοδικές συνοριακές συνθήκες στα δεξιά και αριστερά όρια της κυψελίδας, δηλαδή:

$$T_{left}(0, y) = T_{right}(L, y)$$

με το  $T$  να αντιπροσωπεύει τη θερμοκρασία της διαλυμένης ουσίας. Στα άνω και κάτω όρια η θερμοκρασία  $T$  παραμένει σταθερή, ώστε να δημιουργείται μακροσκοπική διαφορά θερμοκρασίας  $\Delta T$ .

Οι γεωμετρίες που δημιουργήθηκαν έχουν τα εξής χαρακτηριστικά:

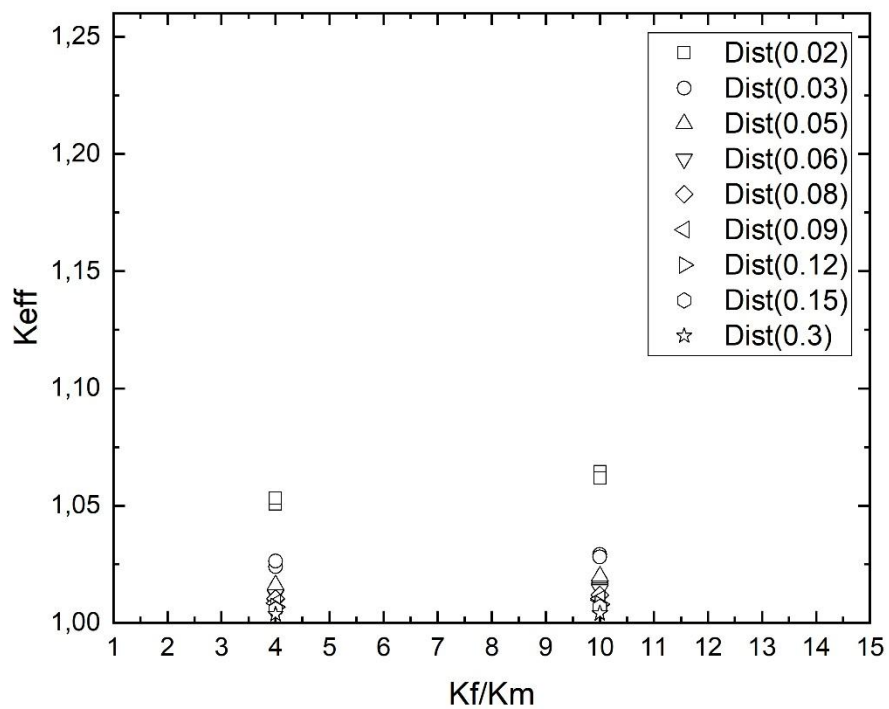
- $N = 500$
- $\alpha\phi = 0.25, 0.5, 1$
- $\alpha = 2, 4, 8$
- $k_{\text{eff}} = k_f / k_m = 4, 10$
- $\theta = 0$
- $\varepsilon = 0$
- $\text{Dist} = 0.02, 0.03, 0.05, 0.06, 0.08, 0.09, 0.12, 0.15, 0.3$

Όπου  $N$  είναι το πλήθος των φυλλιδίων, το  $\alpha\phi$  είναι γινόμενο του λόγου aspect ratio ( $\alpha$ ) πολλαπλασιασμένο με το ποσοστό (%) φόρτισης των φυλλιδίων ( $\phi$ ),  $k_{\text{eff}}$  είναι ο λόγος της θερμικής αγωγιμότητας των σωματιδίων προς την θερμική αγωγιμότητα του μητρικού υλικού,  $\theta$  είναι η γωνία των φυλλιδίων ως προς την ενώ επιφάνεια της μήτρας,  $\varepsilon$  είναι ο τυχαίος προσανατολισμός της γωνίας  $\theta$  και το  $\text{Dist}$  είναι το πάχος της διεπιφάνειας μεταξύ μητρικού και πληρωτικού υλικού. Πιο συγκεκριμένα για το  $\text{Dist}$  που γίνεται ιδιαίτερη αναφορά στη συγκεκριμένη εργασία έχουμε βρει υπολογιστικά ότι ισούται με 0.03 στην περίπτωση που το πάχος της διεπιφάνειας ισούται με μία φορά το πάχος ( $t$ ) των φυλλιδίων. Συνεπώς οι τιμές οι οποίες παρουσιάζονται παραπάνω ισούνται με 0.5t, 1t, 1.5t, 2t, 2.5t, 3t, 3.5t, 4t, 4.5t, 5t, 10t.

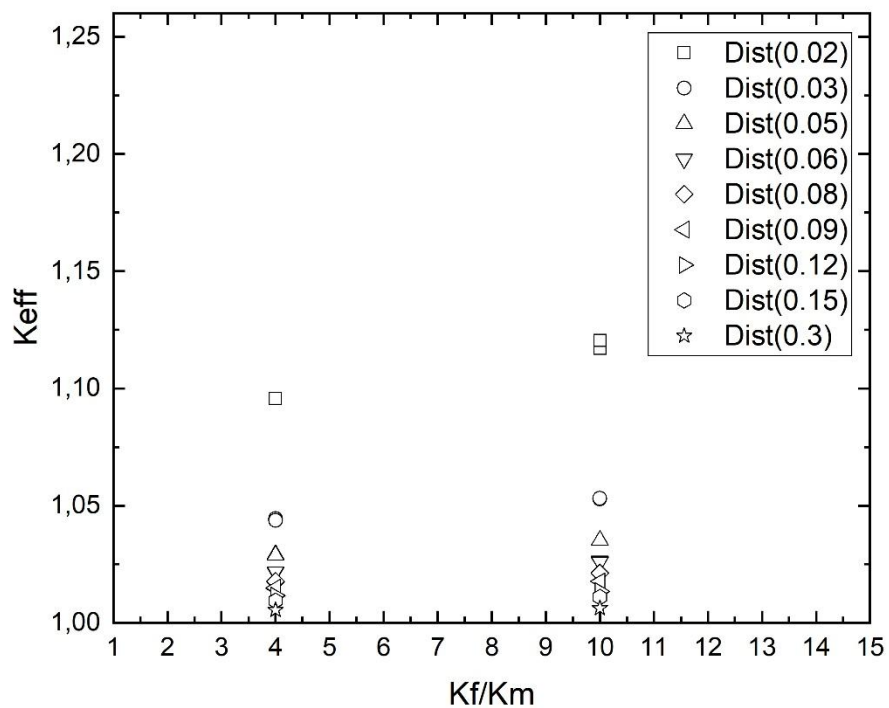
## 4.1 Επίδραση πάχους διεπιφάνειας

### 4.1.1 Διαγράμματα ( $k_{\text{eff}}$ )/( $k_f/k_m$ )

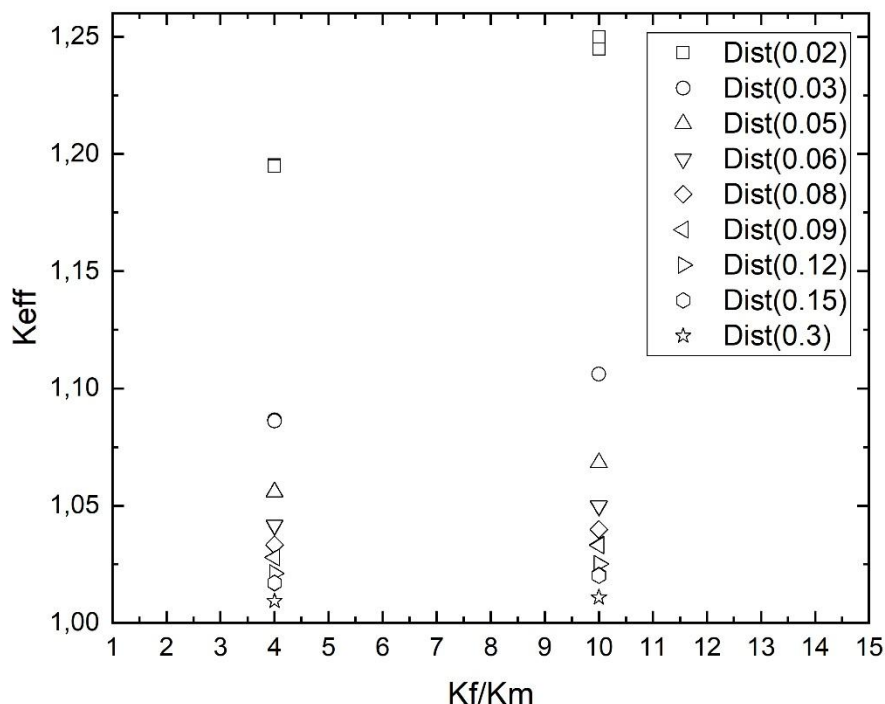
Η επίδραση του πάχους της διεπιφάνειας μεταξύ μητρικού και πληρωτικού υλικού είναι πολύ σημαντική και αποτελεί το επίκεντρο της μελέτης τα τελευταία χρόνια στον τομέα των σύνθετων υλικών καθώς ο χειρισμός του πάχους αυτής μπορεί να βοηθήσει σημαντικά τη μεταφορά θερμότητας εντός του σύνθετου υλικού. Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της υπολογιστικής μελέτης του σύνθετου υλικού που μελετάμε για διάδορα πάχη αυτής της διεπιφάνειας.



**Σχήμα.4.1** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=2$  και  $\alpha\phi=0.25$



**Σχήμα.4.2** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=2$  και  $\alpha\phi=0.5$



**Σχήμα.4.3** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=2$  και  $\alpha\phi=1$

Στα παραπάνω διαγράμματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων και διαπιστώνουμε ότι, η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού αυξάνεται καθώς αυξάνεται ο λόγος  $k_f/k_m$  για όλες τις περιπτώσεις του λόγου  $\alpha\phi$ . Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει όμως η περίπτωση του πάχους της διεπιφάνειας μεταξύ μητρικού και πληρωτικού υλικού. Παρατηρούμε ότι, υπάρχει καλύτερη θερμική αγωγιμότητα στο σύνθετο υλικό μας όταν το πάχος της διεπιφάνειας είναι μικρό και αντίστοιχα όταν το πάχος είναι μεγάλο η θερμική αγωγιμότητα πέφτει. Για να το κατανοήσουμε καλύτερα θα χρησιμοποιήσουμε τον όρο της θερμικής αντίστασης (Thermal Resistance):

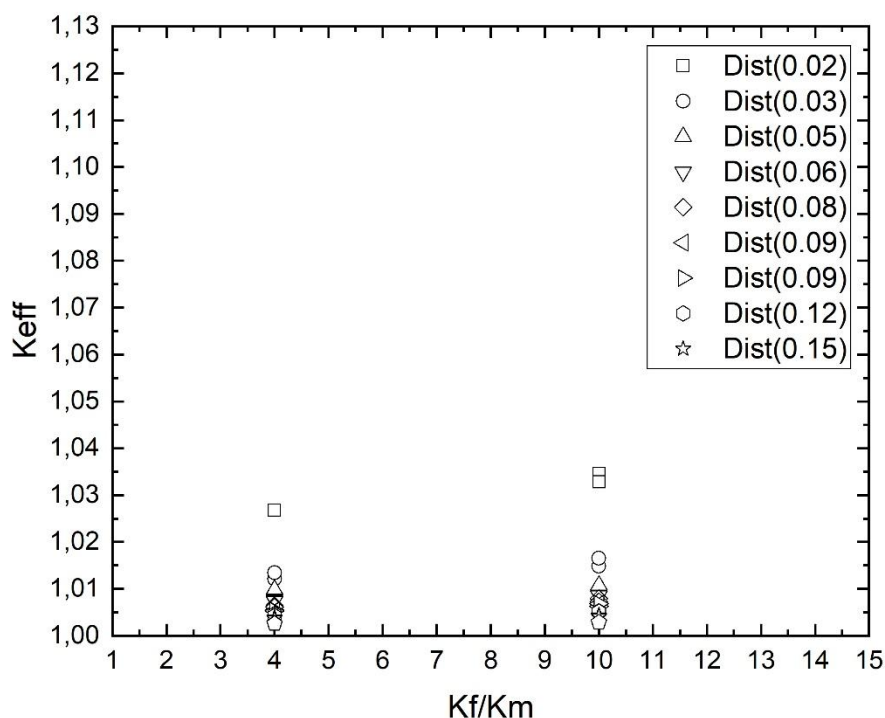
$$R_{th} = \frac{L}{kA} \quad (4.1)$$

Όπου:

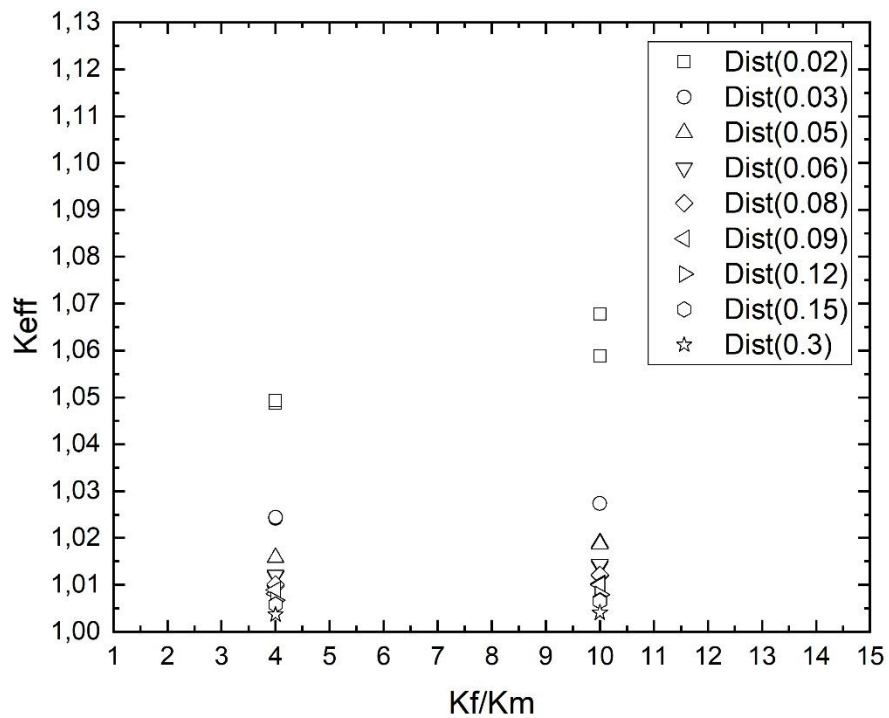
- $L$  πάχος του υλικού
- $A$  επιφάνεια διατομής
- $k$  θερμική αγωγιμότητα

Συνεπώς όσο μεγαλύτερο το  $k$ , τόσο μικρότερη η θερμική αντίσταση, δηλαδή το υλικό δεν είναι καλό θερμικό εμπόδιο. Οπότε σύμφωνα με τα παραπάνω διαγράμματα πρέπει να δημιουργήσουμε υλικά στα οποία η διεπιφάνεια μεταξύ μητρικού και πληρωτικού υλικού πρέπει να είναι όσο μεγαλύτερη γίνεται σύμφωνα με τα δεδομένα του υπολογιστικού μοντέλου, παρόλα αυτά δεν πρέπει να ξεχνάμε την ανάλυση που κάναμε στο 2<sup>ο</sup> κεφάλαιο και τον ρόλο που παίζει η μικροδομή αυτής της

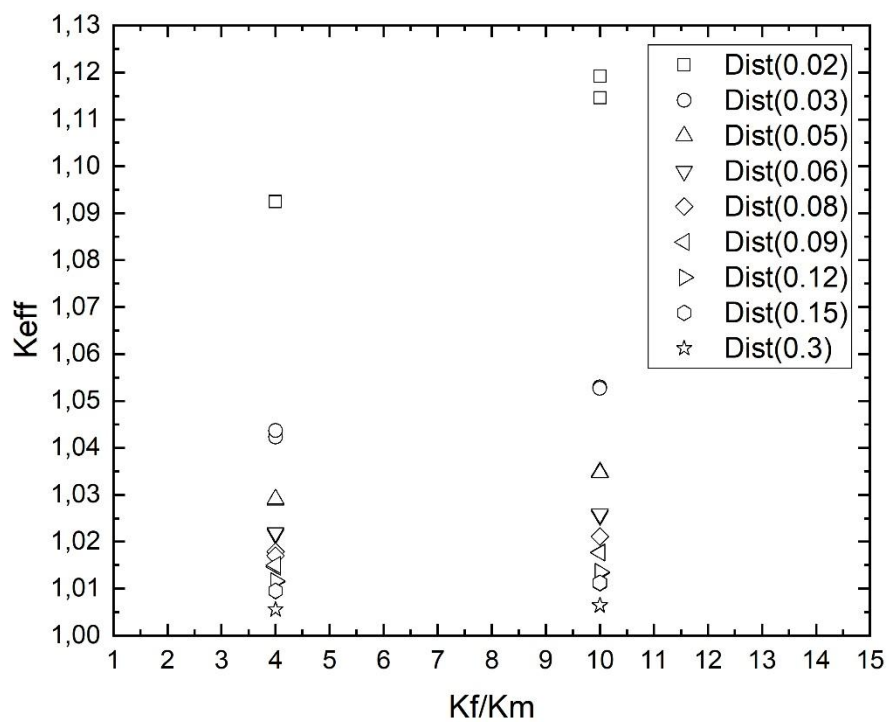
διεπιφάνειας στην μεταφορά της θερμότητας σε εκείνη την περιοχή. Υπάρχει δηλαδή περίπτωση ένα υλικό με μικρότερο πάχος διεπιφάνειας και λεπτόκοκκη μικροδομή να έχει μεγαλύτερη θερμική αντίσταση από ένα υλικό με μεγαλύτερο πάχος διεπιφάνειας και κρυσταλλική μικροδομή. Τέλος, παρατηρείται αύξηση την θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου καθώς αυξάνεται το κλάσμα όγκου των φυλλιδίων (αφ), εφόσον σε γεωμετρίες με μεγαλύτερα  $\Phi$  δημιουργούνται σωματίδια μεγαλύτερων διαστάσεων, με αποτέλεσμα την αύξηση της επιφάνειας των φυλλιδίων που έχουν αυξημένη θερμική αγωγιμότητα σε σχέση με το μητρικό υλικό.



**Σχήμα. 4.4** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=4$  και  $\alpha\phi=0.25$



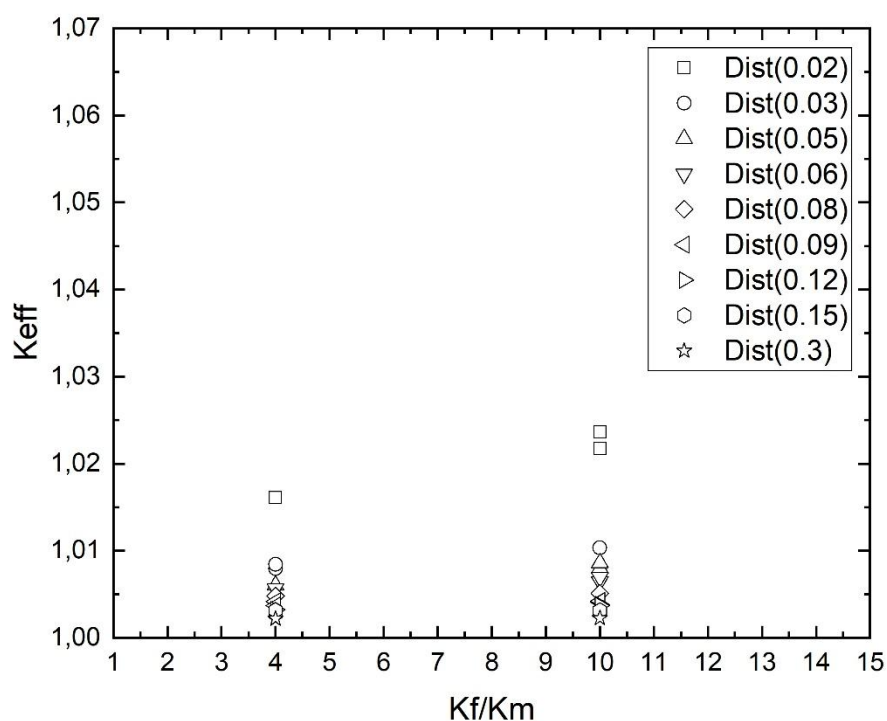
**Σχήμα.4.5** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=4$  και  $\alpha\phi=0.5$



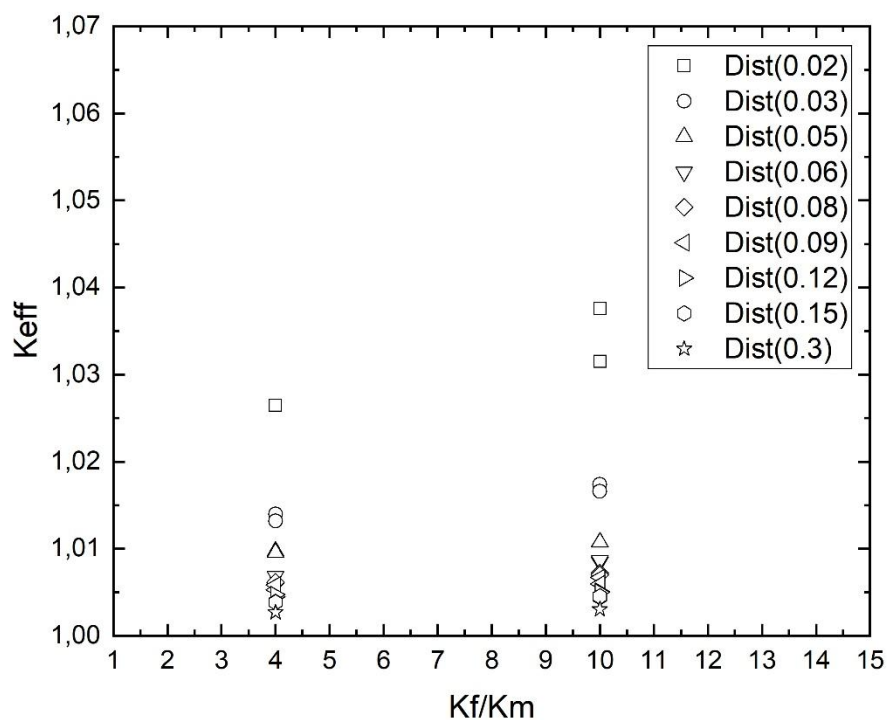
**Σχήμα.4.6** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=4$  και  $\alpha\phi=1$

Για τα διαγράμματα, 4.4, 4.5, 4.6, παρατηρείται ακριβώς η ίδια συμπεριφορά συγκριτικά με τα διαγράμματα 4.1, 4.2, 4.3.

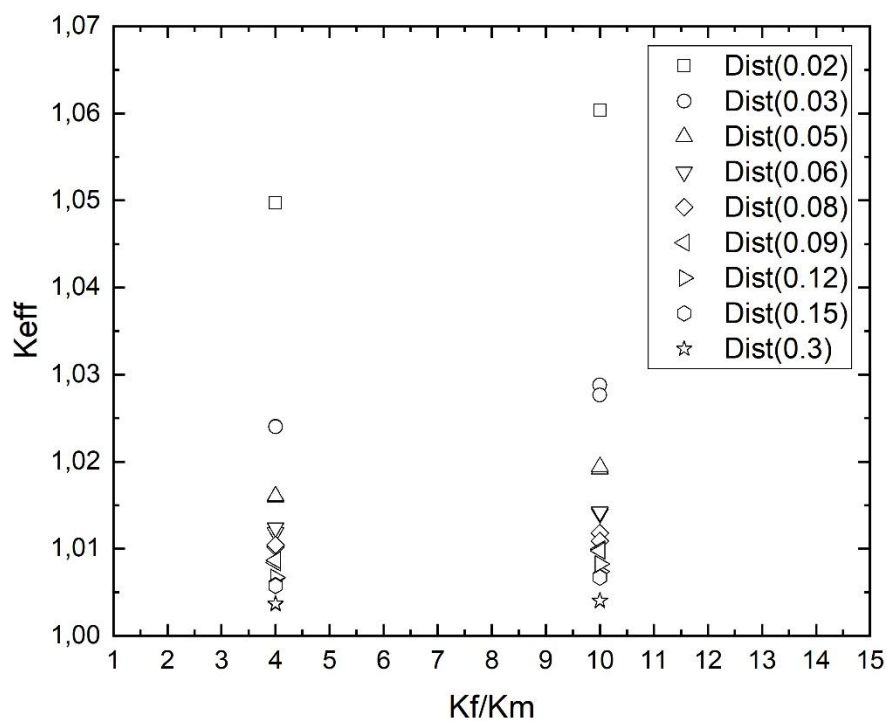
- Όσο αυξάνεται ο λόγος  $k_f/k_m$  η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού αυξάνεται.
- Η αύξηση του πάχους της διεπιφάνειας μεταξύ μητρικού και πληρωτικού υλικού επιφέρει μείωση της θερμικής αγωγιμότητας του υλικού.
- Καθώς αυξάνεται το κλάσμα όγκου των φυλλιδίων ( $\alpha_f$ ) ομοίως αυξάνεται και η θερμική αγωγιμότητα του υλικού για τις αντίστοιχες τιμές των  $k_f/k_m$ .



**Σχήμα.4.7** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=8$  και  $\alpha_f=0.25$



**Σχήμα.4.8** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=8$  και  $\alpha\phi=0.5$



**Σχήμα.4.9** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $k_f/k_m$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=8$  και  $\alpha\phi=1$

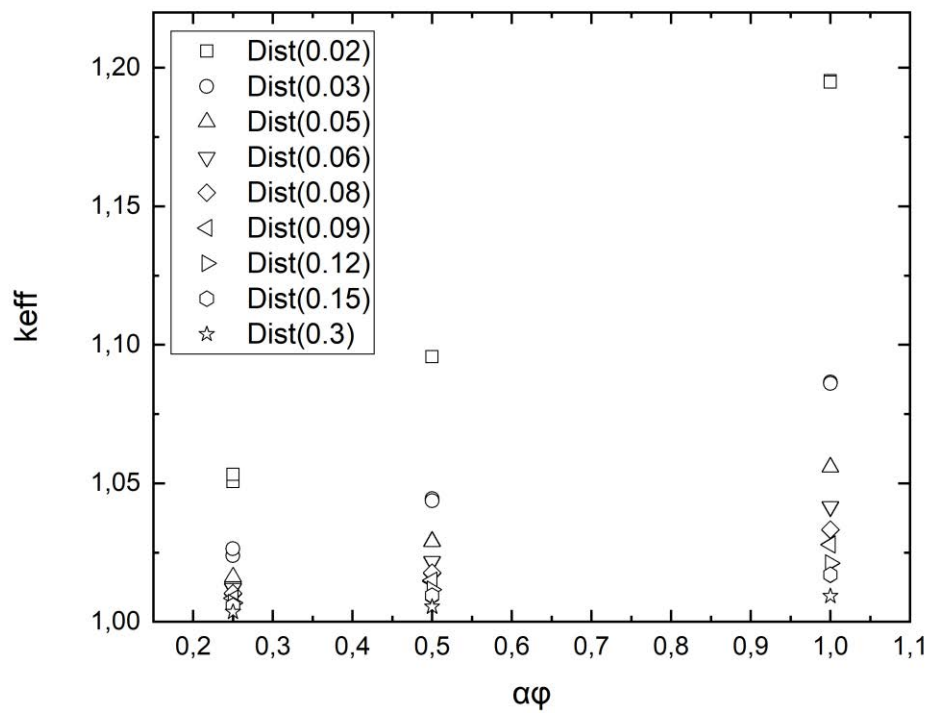
Όπως ήταν αναμενόμενο και στην περίπτωση των διαγραμμάτων 4.7, 4.8, 4.9 παρατηρούνται τα ίδια αποτελέσματα όπως και στις περιπτώσεις των διαγραμμάτων 4.1, 4.2, 4.3 και 4.4, 4.5, 4.6. Σε αυτή τη φάση μπορούμε να συγκρίνουμε τα διαγράμματα υπό σταθερό  $\alpha\phi$  και μεταβαλλόμενο  $\alpha$ .

Για  $\alpha\phi=0.25$  έχουμε τα διαγράμματα 4.1, 4.4, 4.7 με  $\alpha=2$ ,  $\alpha=4$  και  $\alpha=8$  αντίστοιχα. Αφού παρατηρήσουμε τα παραπάνω διαγράμματα μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η αύξηση της τιμής του  $\alpha$  επιφέρει μείωση της θερμικής αγωγιμότητας του υλικού. Αυτό συμβαίνει διότι όσο αυξάνεται ο λόγος διαστάσεων ( $\alpha$ ) των φυλλιδίων, σημαίνει πρακτικά ότι έχουμε μεγαλύτερα φυλλίδια. Τα μεγαλύτερα φυλλίδια εμποδίζουν πιο αποτελεσματικά τη μεταφορά της θερμότητας διαμέσου ενός υλικού, δηλαδή παρέχουν καλύτερη μόνωση.

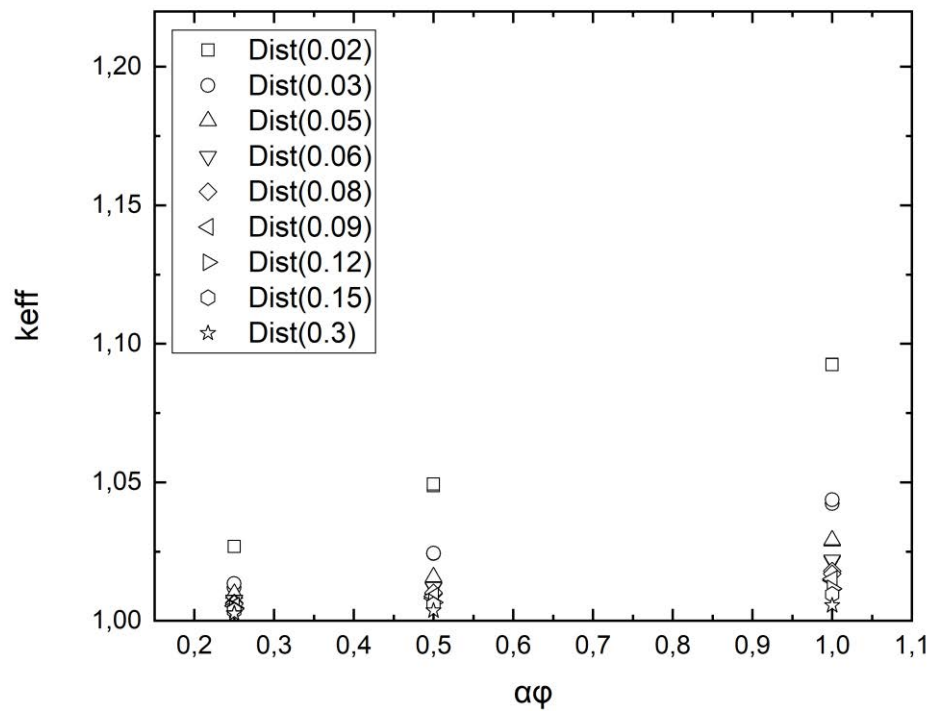
Αν κάνουμε τη σύγκριση για  $\alpha\phi=0.5$  (διαγράμματα 4.2, 4.5, 4.8) και  $\alpha=1$  (διαγράμματα 4.3, 4.6, 4.9) μπορούμε να βγάλουμε το ίδιο συμπέρασμα με την περίπτωση για  $\alpha\phi=0.25$ . Όσο μεγαλύτερο λόγο διαστάσεων έχουμε τόσο μικρότερη είναι και η θερμική αγωγιμότητα του υλικού.

Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω διαγράμματα μπορούμε να βγάλουμε το συμπέρασμα ότι καθώς αυξάνεται το πάχος της διεπιφάνειας μεταξύ μητρικού και πληρωτικού υλικού, ειδικά στην περίπτωση όπου το πάχος της διεπιφάνειας ισούται με 10 φορές το πάχος των φυλλιδίων, η τιμή του  $keff$  τείνει προς το 1 και πιο συγκεκριμένα διαφοροποιούνται στο 3<sup>ο</sup> δεκαδικό ψηφίο. Συνεπώς, εάν μπορούμε να πετύχουμε μεγάλα πάχη της διεπιφάνειας η γεωμετρία των φυλλιδίων δεν παίζει πολύ σημαντικό ρόλο. Βέβαια η περίπτωση του πάχους της διεπιφάνειας να φτάσει 10 φορές το πάχος του πληρωτικού υλικού είναι πολύ εξιδανικευμένη περίπτωση την οποία δεν μπορούμε να δημιουργήσουμε στην πραγματικότητα με βάση την βιβλιογραφική ανασκόπηση την οποία κάναμε στο 2<sup>ο</sup> κεφάλαιο. Για πάχη διεπιφάνειας τα οποία είναι επιτεύξιμα, 1-5 φορές το πάχος του πληρωτικού υλικού, παρατηρούμε ότι τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των φυλλιδίων παίζουν σημαντικό ρόλο και δεν μπορούμε να τα αγνοήσουμε.

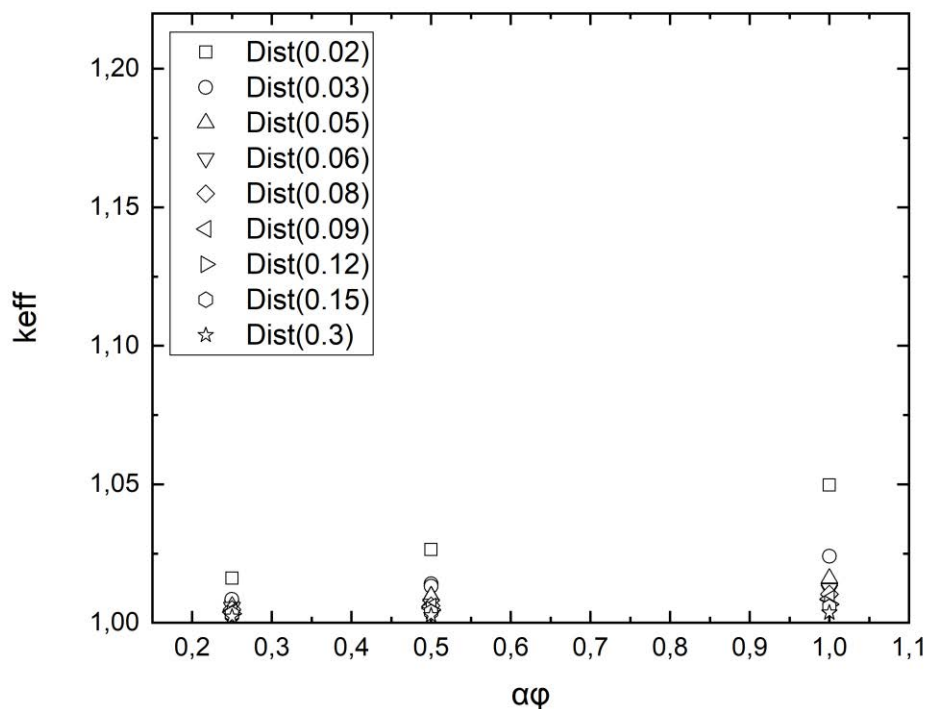
#### 4.1.2 Διαγράμματα ( $k_{eff}$ )/(αφ)



Σχήμα.4.10 - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $\alpha\phi$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=2$  και  $k_f/k_m=4$

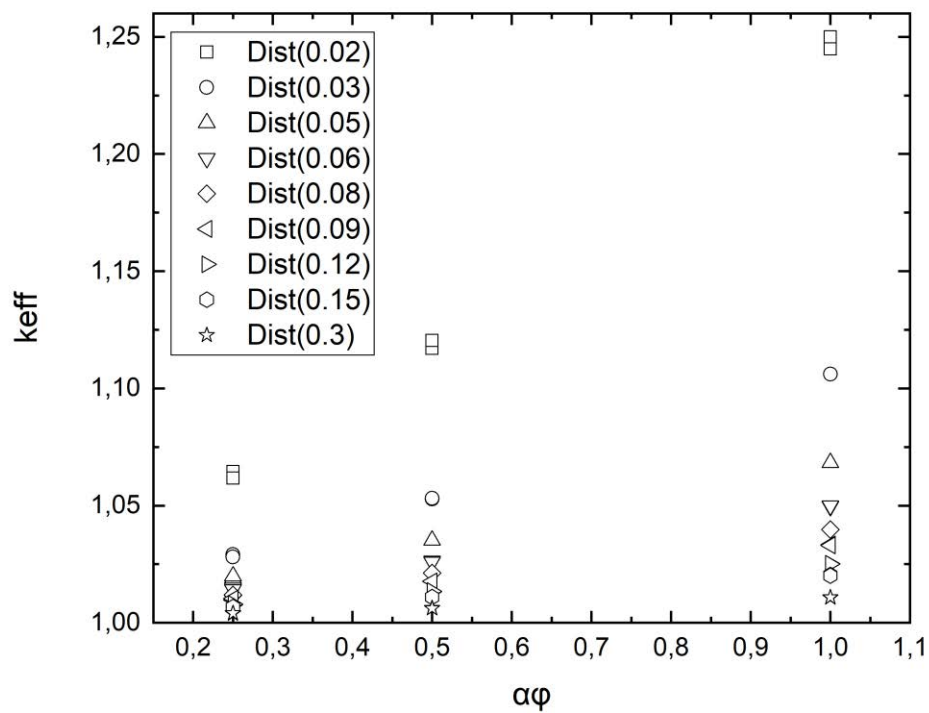


Σχήμα.4.11 - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $\alpha\phi$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=4$  και  $k_f/k_m=4$

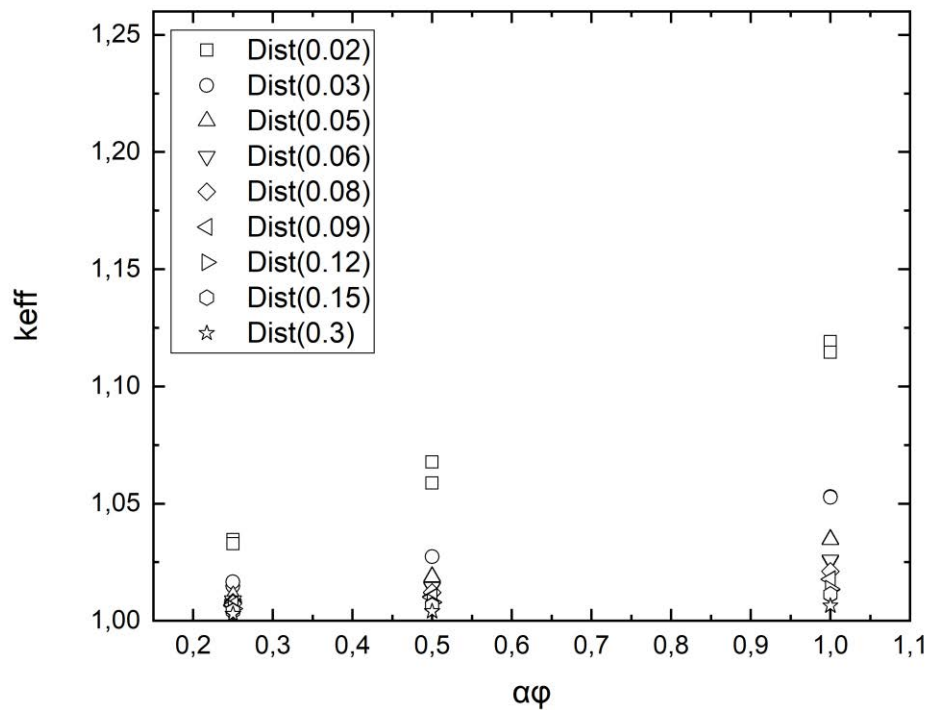


**Σχήμα.4.12** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $\alpha\phi$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=8$  και  $k_f/k_m=4$

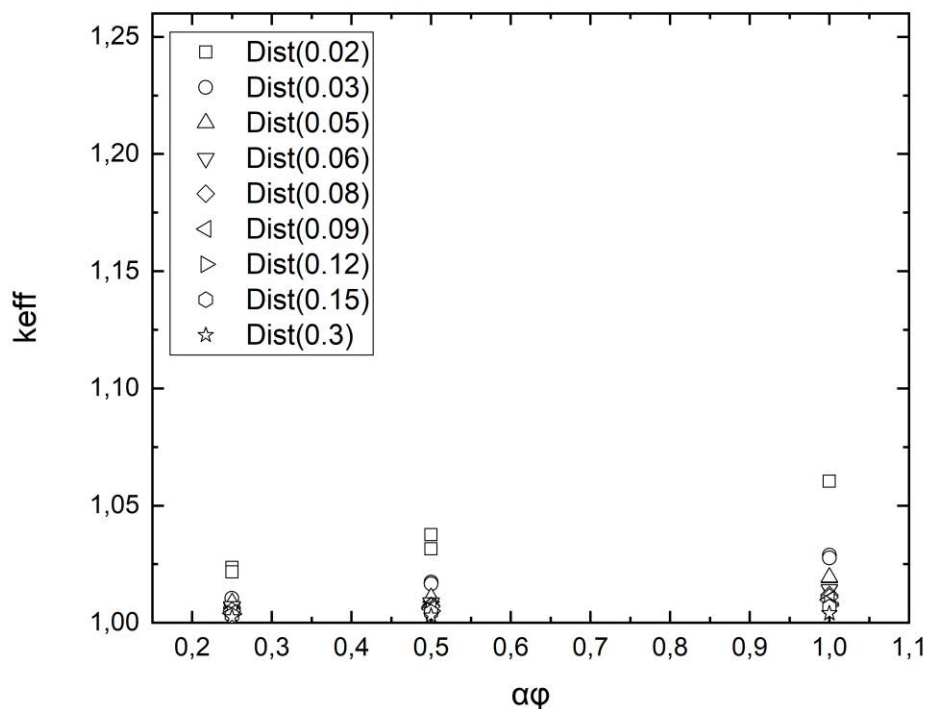
Σύμφωνα με τα παραπάνω διαγράμματα μπορούμε να βγάλουμε ενδιαφέροντα συμπεράσματα όσον αφορά τη συμπεριφορά του υλικού ως προς τη θερμική αγωγιμότητα. Αν παρατηρήσουμε ένα διάγραμμα μεμονωμένα μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η αύξηση του  $\alpha\phi$  σημαίνει ταυτόχρονη αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας του υλικού. Αυτό συμβαίνει καθώς σε γεωμετρίες με μεγαλύτερα  $\Phi$  δημιουργούνται σωματίδια μεγαλύτερων διαστάσεων, με αποτέλεσμα την αύξηση της επιφάνειας των φυλλιδίων που έχουν αυξημένη θερμική αγωγιμότητα σε σχέση με το μητρικό υλικό. Όσον αφορά τη διεπιφάνεια και σε αυτά τα διαγράμματα γίνεται αντιληπτό ότι για να δημιουργήσουμε ένα υλικό το οποίο θα εμποδίζει τη μετάδοση θερμότητας μέσω του υλικού πρέπει να στοχεύουμε στην δημιουργία όσο το δυνατόν μεγαλύτερα πάχη. Τέλος, κατά τη σύγκριση και των τριών διαγραμμάτων διαπιστώνουμε ότι η αύξηση του λόγου διαστάσεων ( $\alpha$ ) των φυλλιδίων δημιουργεί υλικά τα οποία έχουν καλύτερη συμπεριφορά στην παρεμπόδιση της μεταφοράς θερμότητας, δηλαδή δημιουργεί υλικά με χαμηλή θερμική αγωγιμότητα.



Σχήμα.4.13 - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $\alpha\phi$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=2$  και  $k_f/k_m=8$



Σχήμα.4.14 - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $\alpha\phi$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=4$  και  $k_f/k_m=8$



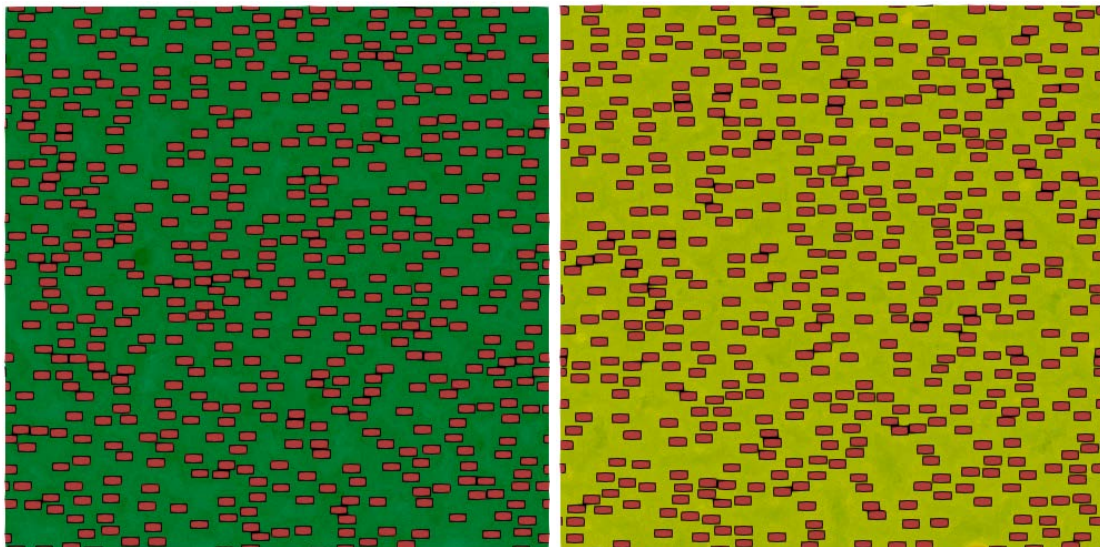
**Σχήμα.4.15** - Αποτελέσματα για το  $K_{eff}$  συναρτήσει του  $\alpha\phi$ , για γεωμετρίες με  $N=500$ ,  $\alpha=8$  και  $k_f/k_m=8$

Παρόμοια διαπίστωση γίνεται και στα διαγράμματα 4.13, 4.14, 4.15 συγκριτικά με τα διαγράμματα 4.10, 4.11, 4.12. Μπορούμε βέβαια να προσθέσουμε επιπλέον ότι κατά τη αύξηση του λόγου  $k_f/k_m$  η θερμική αγωγιμότητα αυξάνεται.

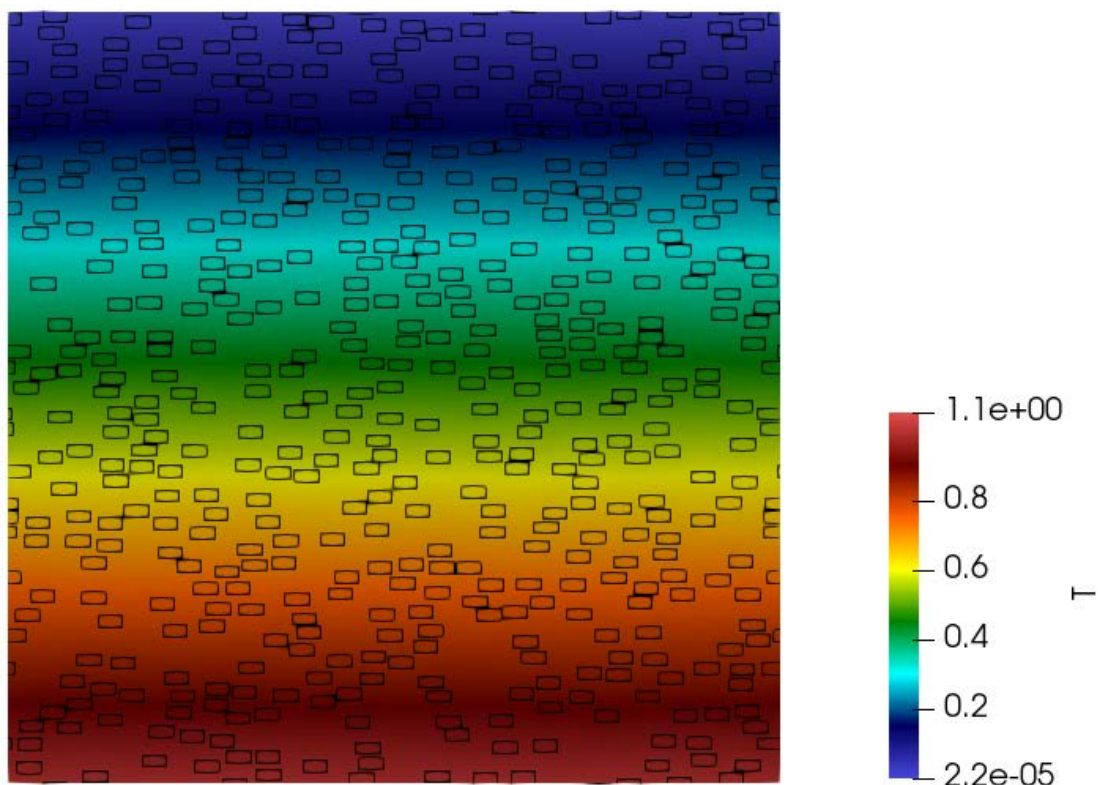
## 4.2 Οπτικοποίηση Αποτελεσμάτων με το Paraview

Εκτός από τα διαγράμματα ο OpenFOAM μας παρέχει ένα σημαντικό εργαλείο κατά το οποίο μπορούμε να κάνουμε ανάλυση και ταυτόχρονα να οπτικοποιήσουμε τα δεδομένα από τις προσομοιώσεις. Για την υπολογιστική ρευστοδυναμική το Paraview είναι ένα εξαιρετικό εργαλείο. Στις παρακάτω εικόνες θα δώσουμε μερικά παραδείγματα για να κατανοήσουμε περισσότερο τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις μας και τα παραπάνω διαγράμματα. Στο παράρτημα Β παρέχονται επιπλέον εικόνες από το Paraview.

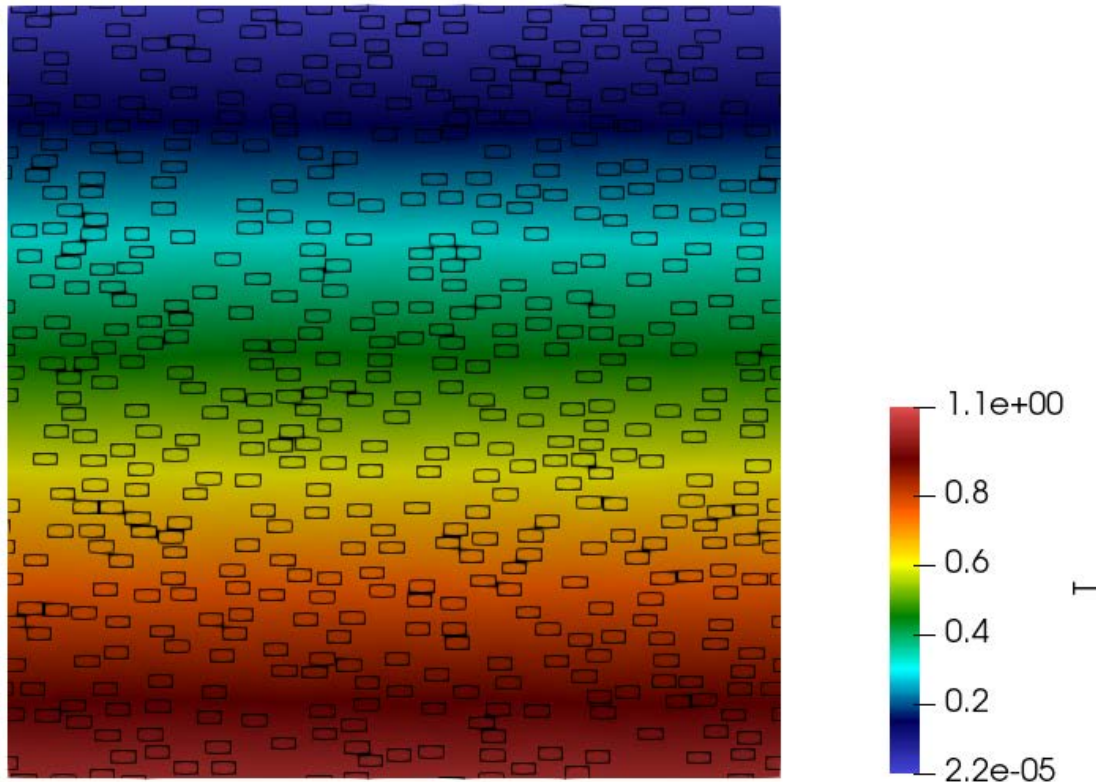
#### 4.2.1 Επίδραση $k_f/k_m$ στην θερμική αγωγιμότητα.



**Σχήμα.4.15** - Πεδίο θερμικής αγωγιμότητας για 2 περιπτώσεις με κοινές ιδιότητες  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=2$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$  με διαφορά στη τιμή του  $k_f/k_m=4$  (αριστερά),  $k_f/k_m=10$  (δεξιά).



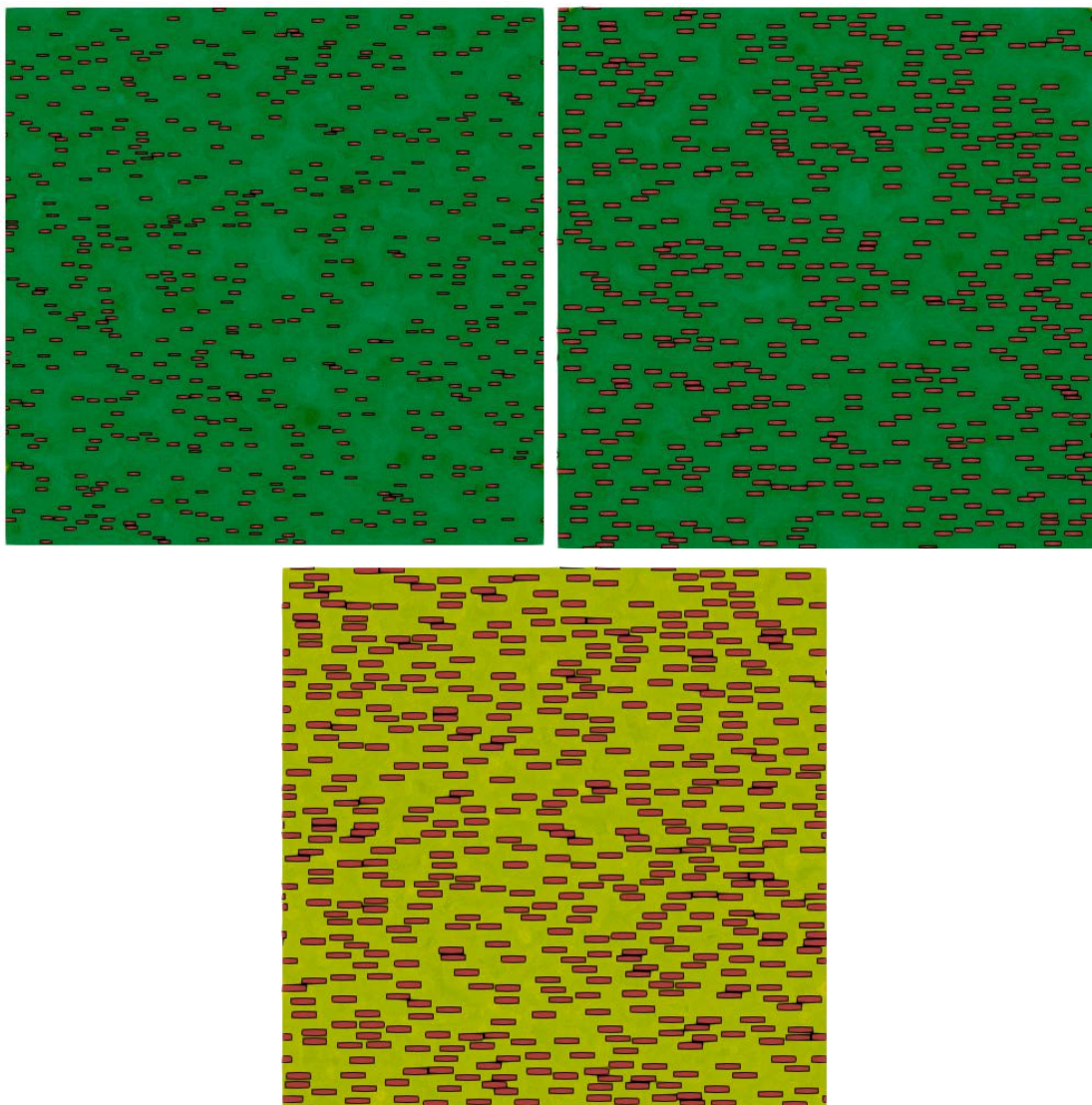
**Σχήμα.4.16** – Θερμοκρασιακό πεδίο για  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=2$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$ ,  $k_f/k_m=4$



**Σχήμα.4.17** – Θερμοκρασιακό πεδίο για  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=2$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$ ,  $kf/km=10$

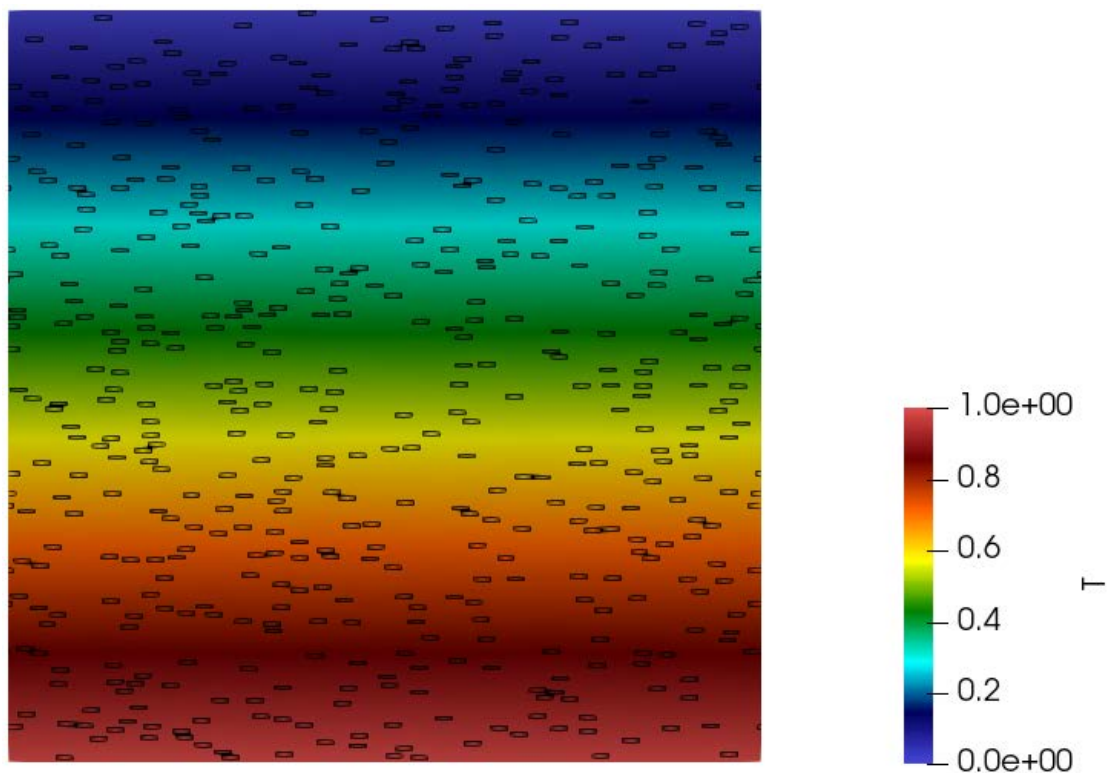
Στις παραπάνω εικόνες γίνεται εμφανές ότι στο πεδίο θερμικής αγωγιμότητας το υλικό με μεγαλύτερο λόγο  $kf/km$  παρουσιάζει μικρότερη αντίσταση στη ροή θερμότητας συνεπώς αυξάνεται η θερμική αγωγιμότητα του υλικού. Τα χρώματα ακολουθούν την παλέτα που χρησιμοποιείται στα διαγράμματα του θερμοκρασιακού πεδίου. Όπως έχουμε αναφέρει το  $\Delta T$  των προσομοιώσεων ισούται με 1K με  $T_{Bottom}=301K$  και  $T_{top}=300K$ . Από το θερμοκρασιακό πεδίο δεν μπορούμε να βγάλουμε σπουδαία συμπεράσματα καθώς η μόνη διαφορά που παρατηρούμε είναι στην κλίμακα, κατά την οποία στο υλικό με το μεγαλύτερο λόγο  $kf/km$  έχει μεγαλύτερο όγκο σε πιο «θερμή» περιοχή καθώς οι τιμές από 0.4 έως 1 βρίσκονται από την κόκκινη έως την πράσινη περιοχή σε αντίθεση με το υλικό με μικρότερο  $kf/km$  οι ίδιες τιμές φτάνουν έως την γαλάζια περιοχή.

#### 4.2.2 Επίδραση αφ στην θερμική αγωγιμότητα.

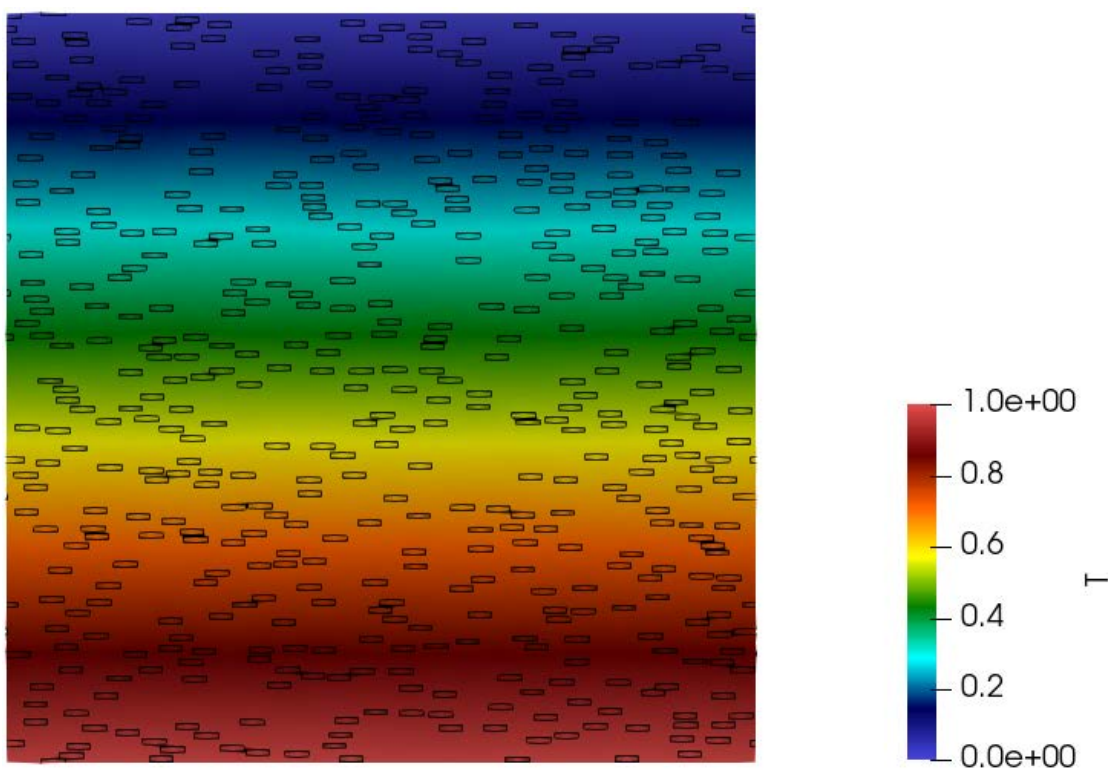


**Σχήμα.4.18** - Πεδίο θερμικής αγωγιμότητας για 3 περιπτώσεις με κοινές ιδιότητες  $a=4$ ,  $k_f/k_m=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$  με διαφορά στη τιμή του  $\alpha\phi=0.25$  (αριστερά),  $\alpha\phi=0.5$  (δεξιά),  $\alpha\phi=1$  κάτω.

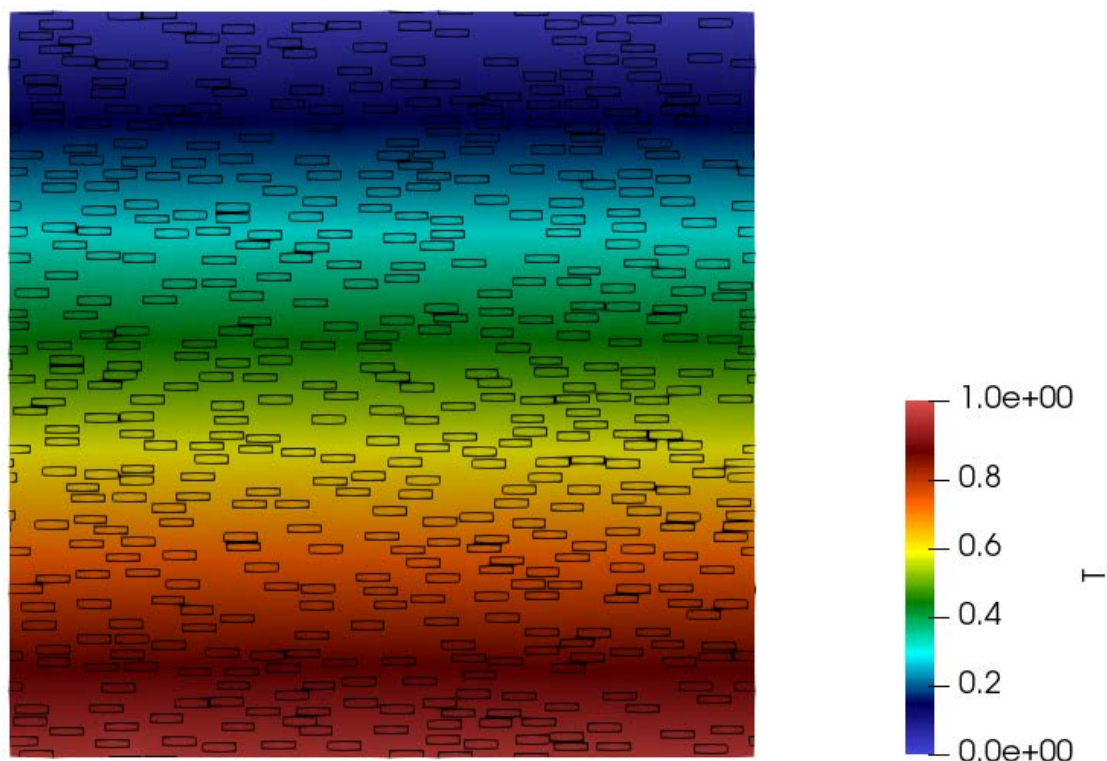
Λαμβάνοντας υπόψιν μας το πεδίο θερμικής αγωγιμότητας κατανοούμε ότι η αύξηση του  $\alpha\phi$  επιφέρει αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας τους σύνθετου υλικού όπως ακριβώς συμφωνεί και με τα παραπάνω αποτελέσματα.



**Σχήμα.4.19**– Θερμοκρασιακό πεδίο για  $\alpha\phi=0.25$ ,  $a=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$ ,  $k_f/k_m=4$

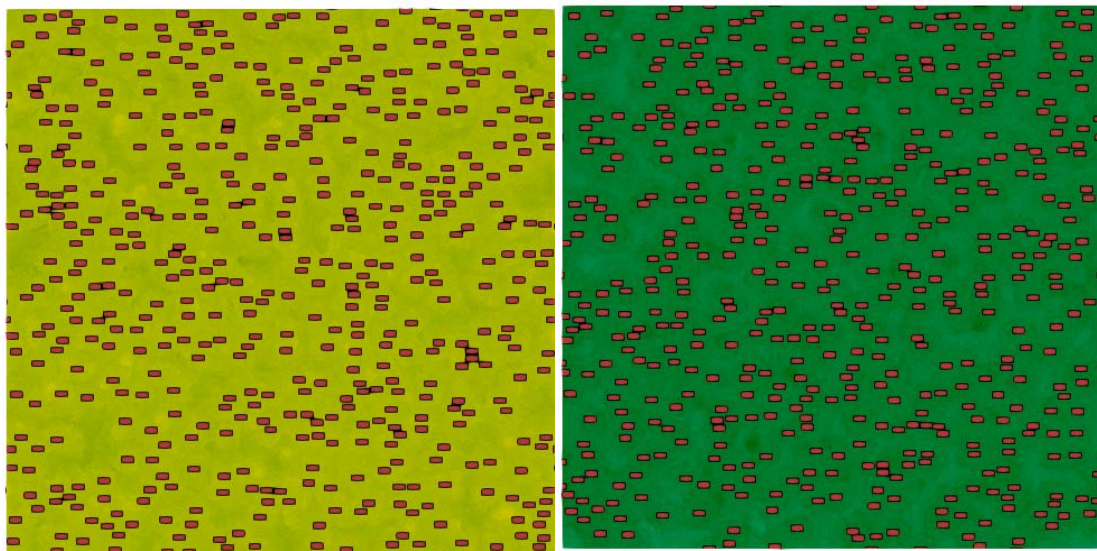


**Σχήμα.4.20**– Θερμοκρασιακό πεδίο για  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$  με διαφορά στη τιμή του  $k_f/k_m=4$



**Σχήμα.4.21**– Θερμοκρασιακό πεδίο για  $af=1$ ,  $a=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$  με διαφορά στη τιμή του  $k_f/k_m=4$

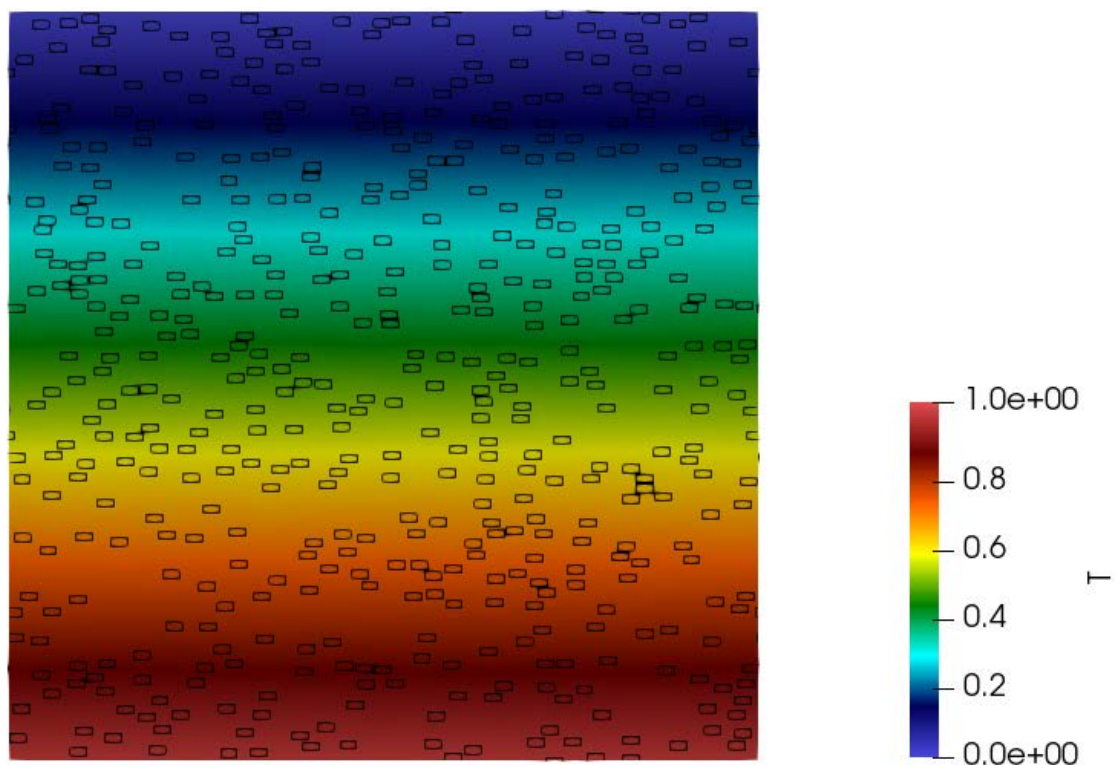
Από το θερμοκρασιακό πεδίο δεν μπορούμε να βγάλουμε σπουδαία συμπεράσματα καθώς η μόνη διαφορά που παρατηρούμε είναι στην κλίμακα, κατά την οποία οι τιμές από 1 έως 0.6 στο υλικό με  $af=1$  καταλαμβάνει μεγαλύτερο όγκο από το υλικό με τιμή  $af=0.25$ . Το αντίθετο συμβαίνει στην περιοχή 0-0.2. Μεταξύ των υλικών  $af=1$  και  $af=0.5$  δεν μπορούμε να παρατηρήσουμε μεγάλη διαφορά. Αυτό μπορεί να οφείλεται και στον τυχαίο τρόπο που κατανέμει τα φυλλίδια το πρόγραμμα Autopilot. Όταν τα φυλλίδια έχουν μεγαλύτερο  $af$  κατανέμονται πιο ομοιόμορφα μέσα στο υλικό συγκριτικά με το μικρότερο  $af$  που αφήνει μεγαλύτερα κενά εντός της κυψελίδας.



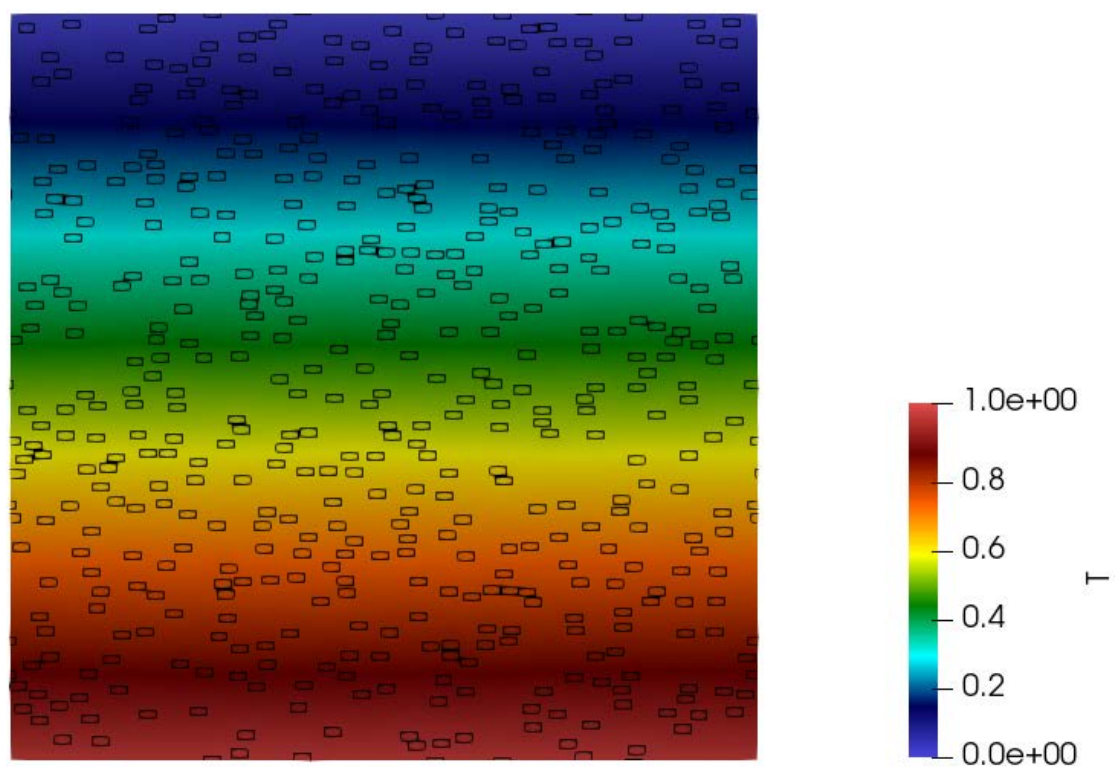
**Σχήμα.4.22** - Πεδίο θερμικής αγωγιμότητας για 2 περιπτώσεις με κοινές ιδιότητες  $\alpha\phi=0.25$ ,  $a=2$ ,  $kf/km=$ ,  $N=500$  με διαφορά στη τιμή του  $Dist=0.03$  (αριστερά),  $Dist=0.30$  (δεξιά).

Για τα παραπάνω πεδία θερμική αγωγιμότητας παρατηρούμε ότι η αύξηση του πάχους της διεπιφάνειας αυξάνει τη θερμική αντίσταση του υλικού και μειώνει τη θερμική αγωγιμότητα. Βέβαια πρέπει να σημειωθεί ότι για τιμές διεπιφάνειας οι οποίες, με βάση τη θεωρία, ανήκουν στο εύρος από 1 έως 5 φορές του πάχους του πληρωτικού υλικού (φυλλιδίων), δεν παρατηρείται σημαντική διαφοροποίηση στη θερμική αγωγιμότητα του υλικού. Το παραπάνω συμπέρασμα το έχουμε αναλύσει παραπάνω διότι με βάση τις προσομοιώσεις η διαφορά στο  $keff$  είναι στο  $2^o$  με  $3^o$  δεκαδικό ψηφίο.

Στα παρακάτω θερμοκρασιακά πεδία φαίνεται διαφορά στην πράσινη και γαλάζια περιοχή των διαγραμμάτων. Για  $Dist=0.30$  η γαλάζια περιοχή είναι πιο εκτενής σε σχέση με το υλικό για  $Dist=0.03$ . Για παράδειγμα η τιμή 0.4 βρίσκεται στη γαλάζια περιοχή του πρώτου υλικού ενώ στο δεύτερο υλικό βρίσκεται στην πράσινη περιοχή.



*Σχήμα.4.23– Θερμοκρασιακό πεδίο για  $\alpha\phi=0.25$ ,  $a=2$ ,  $kf/km=4$ ,  $N=500$   $Dist=0.03$*



*Σχήμα.4.24– Θερμοκρασιακό πεδίο για  $\alpha\phi=0.25$ ,  $a=2$ ,  $kf/km=4$ ,  $N=500$ ,  $Dist=0.30$*

## 5. Συμπεράσματα – Σχολιασμός Αποτελεσμάτων

Η μελέτη της διεπιφάνειας μεταξύ μήτρας και πληρωτικού υλικού αποτελεί καθοριστικό παράγοντα για την απόδοση των σύνθετων υλικών, ιδιαίτερα όσον αφορά τις θερμικές, μηχανικές και ηλεκτρικές τους ιδιότητες. Η διεπιφάνεια δεν είναι μια γραμμική οριοθέτηση, αλλά μια ζώνη αλληλεπίδρασης με μεταβαλλόμενα χαρακτηριστικά, η οποία μπορεί να επηρεάσει έντονα τη θερμική αγωγιμότητα μέσω φαινομένων όπως η θερμική αντίσταση Kapitza, η σκέδαση φωνονίων και η ασυμφωνία στην πυκνότητα καταστάσεων (Density of States – DOS). Η βιβλιογραφία δείχνει ότι το πάχος της διεπιφάνειας μπορεί να κυμαίνεται από 1 έως 5 φορές το πάχος του πληρωτικού, με την ποιότητα της δομής της (αμορφική, ημι-κρυσταλλική ή κρυσταλλική) να καθορίζει αν η θερμοαγωγιμότητα θα βελτιωθεί ή θα περιοριστεί. Επιπλέον, η παρουσία λεπτόκοκκης δομής αυξάνει τη θερμική αντίσταση αλλά μπορεί να ενισχύσει τη μηχανική αντοχή.

Η μορφολογία και οι ιδιότητες της διεπιφάνειας επηρεάζονται από πολλούς παράγοντες, όπως το μέγεθος και ο προσανατολισμός των φυλλιδίων, οι συνθήκες παραγωγής και η χρήση χημικών τροποποιητών. Για τον χαρακτηρισμό της διεπιφάνειας χρησιμοποιούνται προηγμένες μικροσκοπικές, φασματοσκοπικές και θερμικές τεχνικές, όπως TEM, AFM, Raman και TDTR, οι οποίες επιτρέπουν τη λεπτομερή μελέτη της δομής και της αγωγιμότητας σε νανοκλίμακα. Τα ευρήματα αυτών των τεχνικών υπογραμμίζουν ότι η διεπιφάνεια μπορεί να κυριαρχήσει στη θερμοφυσική συμπεριφορά ενός σύνθετου, ειδικά σε συστήματα με νανοσωματίδια ή φυλλίδια.

Η βελτιστοποίηση της διεπιφάνειας απαιτεί πολυπαραγοντική προσέγγιση, με στρατηγικές που περιλαμβάνουν χημική λειτουργικοποίηση, μηχανικές μεθόδους ανάμιξης και θερμικές κατεργασίες όπως η ανόπτηση. Τέτοιες τεχνικές μπορούν να μειώσουν την αντίσταση Kapitza, να ελέγξουν το πάχος της διεπιφάνειας και να βελτιώσουν την πρόσφυση μεταξύ των φάσεων. Συνολικά, η διεπιφάνεια αναδεικνύεται σε βασικό εργαλείο σχεδιασμού για την ανάπτυξη προηγμένων σύνθετων υλικών, με τις μελλοντικές έρευνες να επικεντρώνονται σε νέες τεχνικές τροποποίησης και σε πολυκλιμακωτά μοντέλα προσομοίωσης που θα επιτρέψουν πιο ακριβή πρόβλεψη και έλεγχο των ιδιοτήτων της.

Για να κατανοήσουμε πώς συμπεριφέρεται η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού σε διάφορα πάχη της διεπιφάνειας χρειάστηκε να προσομοιώσουμε στον OpenFOAM ένα υλικό στο οποίο το πάχος της διεπιφάνειας μεταβαλλόταν. Το πάχος αυτό εξαρτάται από το πάχος ( $t$ ) του πληρωτικού υλικού. Συνεπώς μελετήσαμε περιπτώσεις για πάχη 0.5t, 1t, 1.5t, 2t, 2.5t, 3t, 3.5t, 4t, 4.5t, 5t, 10t με ταυτόχρονη μεταβολή ορισμένων χαρακτηριστικών της κυψελίδας-φυλλιδίων, όπως ο λόγος της θερμικής αγωγιμότητας των σωματιδίων προς την θερμική αγωγιμότητα του μητρικού υλικού  $k_f/k_m$ , ο λόγος διαστάσεων των φυλλιδίων  $a$ , το γινόμενο του λόγου  $a$  επί το ποσοστό φόρτισης των φυλλιδίων  $\phi$  ο οποίος γράφεται ως αφ.

Τα συμπεράσματα των παραπάνω προσομοιώσεων έδειξαν ότι για να πετύχουμε καλύτερη θερμική αντίσταση σε υλικό πρέπει να στοχεύουμε στη δημιουργία μεγάλων παχών διεπιφάνειας. Ιδιαίτερα για αρκετά μεγάλα πάχη διεπιφάνειας μπορούμε να αγνοήσουμε, ως ένα βαθμό, τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά τα οποία μελετάμε στην παρούσα εργασία. Για μικρότερα πάχη διεπιφάνειας τα χαρακτηριστικά των φυλλιδίων μπορούν να δώσουν διαφορετικές θερμικές

αντιστάσεις στο υλικό. Για αύξηση του  $\alpha$ φ υπό σταθερές τις υπόλοιπες μεταβλητές παρατηρούμε μείωση της θερμικής αντίστασης, συνεπώς αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας. Το αντίστροφο συμβαίνει με το λόγο διαστάσεων  $\alpha$  ο οποίος όταν αυξάνεται η θερμική αγωγιμότητα μειώνεται και η θερμική αντίσταση του υλικού αυξάνεται. Τέλος για τον λόγο  $kf/km$  μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η αύξηση αυτού ακολουθεί την ίδια συμπεριφορά με το  $\alpha$ φ, δηλαδή αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας και μείωση τη θερμικής αντίστασης.

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

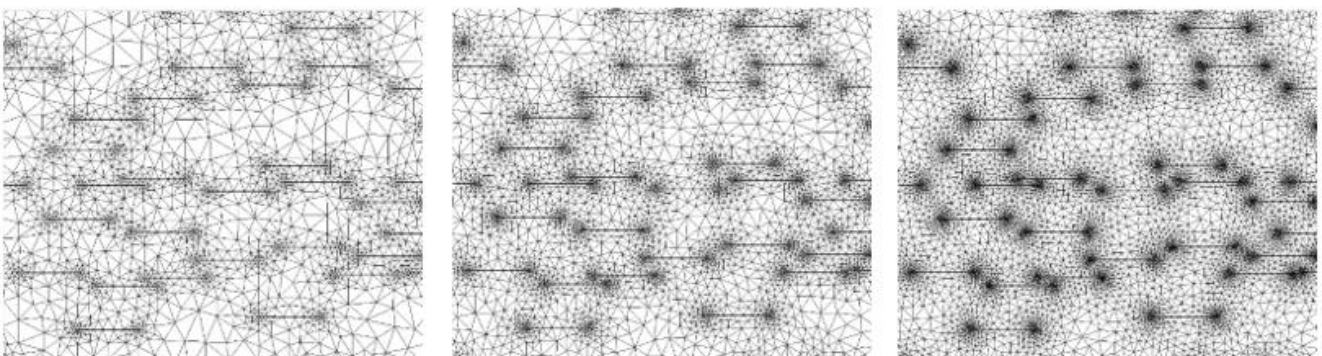
### ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α – ΧΩΡΙΚΗ ΣΥΓΚΛΙΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ

Για να εκτιμηθεί η ακρίβεια μιας προσομοίωσης είναι απαραίτητο να εξεταστεί η χωρική σύγκλισή της. Ο έλεγχος αυτός αποτελεί μία σχετικά απλή διαδικασία, αλλά ταυτόχρονα είναι καθοριστικός προκειμένου να περιοριστούν τα σφάλματα που προκύπτουν από τη διακριτοποίηση. Η μέθοδος της παρεμβολής Richardson μας δίνει τη δυνατότητα να προσεγγίσουμε την τιμή μιας συνάρτησης στην ιδανική περίπτωση όπου το βήμα του πλέγματος τείνει στο μηδέν (άπειρα πυκνό πλέγμα). Αυτό επιτυγχάνεται εκτελώντας προσομοιώσεις με διαδοχικά πιο εκλεπτυσμένα πλέγματα. Το βασικό πλεονέκτημα είναι ότι μπορούμε να υπολογίσουμε την οριακή τιμή  $h=0$  χρησιμοποιώντας ακόμα και πιο αραιά πλέγματα, μειώνοντας έτσι τις απαιτήσεις σε υπολογιστικούς πόρους.

Η μεθοδολογία στηρίζεται στην εκτέλεση δύο ή περισσότερων υπολογισμών με διαφορετική πυκνότητα πλέγματος. Όσο μικρότερο γίνεται το μέγεθος των κελιών και μεγαλύτερος ο συνολικός αριθμός τους, τόσο περιορίζονται τα σφάλματα διακριτοποίησης και η λύση συγκλίνει ασυμπτωτικά στο θεωρητικό όριο μηδενικής απόστασης πλέγματος. Η τάξη σύγκλισης για τρία επίπεδα εκλέπτυνσης προσδιορίζεται από τη σχέση:

$$p = \ln \left( \frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right) / \ln(r) \quad (A1)$$

όπου  $r=h_2/h_1$  είναι ο λόγος εκλέπτυνσης του πλέγματος και  $f_1, f_2$ , οι αντίστοιχες υπολογισμένες τιμές της συνάρτησης. Στις παρακάτω εικόνες παρουσιάζονται παραδείγματα αραιού, μεσαίου και πυκνού πλέγματος:



*Σχήμα. Α.1 - Ενδεικτικό αραιό, μεσαίο και πυκνό πλέγμα αντίστοιχα*

Με βάση την εξίσωση (A1), η εκτίμηση της τιμής της συνάρτησης στο όριο μηδενικού βήματος πλέγματος δίνεται από:

$$f_{h=0} \cong f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1} \quad (A2)$$

Η αξιοπιστία της εκτίμησης αυτής ελέγχεται μέσω του δείκτη σύγκλισης πλέγματος (GCI – Grid Convergence Index).

$$GCI_{fine} = \frac{F_s |e|}{r^p - 1} \quad (A3)$$

Για το πυκνό πλέγμα ο GCI ορίζεται ως:  
όπου  $F_s$  είναι ο συντελεστής ασφαλείας, με τιμή 3 όταν συγκρίνονται δύο πλέγματα ή 1.25 όταν συγκρίνονται τρία. Για το αραιότερο πλέγμα ο δείκτης δίνεται από:

$$GCI_{coarse} = \frac{r^p F_s |e|}{r^p - 1} = r^p GCI_{1.2} \quad (A4)$$

Εάν, τελικά, ο λόγος μεταξύ του δείκτη GCI του πυκνού και εκείνου του αραιού πλέγματος προσεγγίζει τη μονάδα  $\frac{GCI_{2.3}}{r^p \times GCI_{1.2}} \cong 1$  τότε μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι υπολογισμοί έγιναν εντός της ασυμπτωτικής περιοχής σύγκλισης και, συνεπώς, η εκτίμηση της τιμής  $f_{h=0}$  αξιόπιστη.

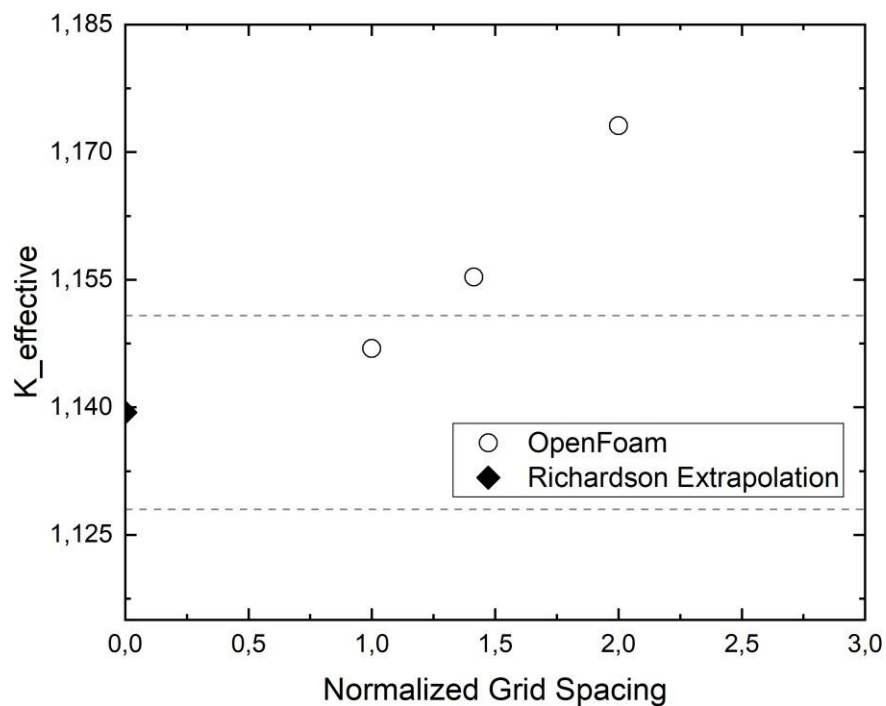
Για να γίνουν τα παραπάνω πλήρως κατανοητά θα παραθέσουμε ένα παράδειγμα. Χρησιμοποιούμε την περίπτωση με  $N=500$  και  $\alpha\phi=0.25$ , για την οποία δημιουργήθηκαν στο σύνολο τρία πλέγματα με προοδευτικά πιο αραιό πλέγμα. Σύμφωνα με την εξίσωση (A1) η σειρά σύγκλισης βρέθηκε

$$p = \ln\left(\frac{1.1731 - 1.1553}{1.1553 - 1.1469}\right) / \ln(1.1442) = 2.1668$$

Στη συνέχεια από τη σχέση A2 βρίσκουμε  $f_{h=0} = 1.13939$  και διότι χρησιμοποιούμε τρία πλέγματα το  $F_s = 1.25$ .

Οι δείκτες GCI για τα πλέγματα είναι:  $GCI_{1.2} = 0.008181$  και  $GCI_{2.3} = 0.01721$ . Τα σφάλματα μεταξύ των πλεγμάτων είναι  $\varepsilon_{1.2} = 0.0073$  και  $\varepsilon_{2.3} = 0.0154$ .

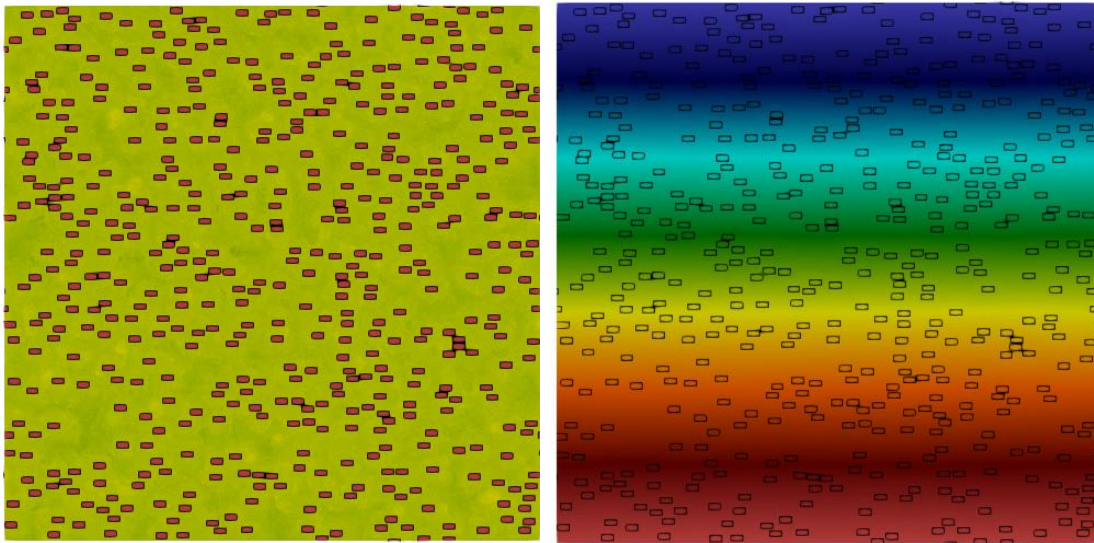
Συνεπώς η αναλογία του ασυμπτωτικού εύρους σύγκλισης είναι  $0.99346 \cong 1$  το οποίο δείχνει ότι βρισκόμαστε στην περιοχή ασυμπτωτικής σύγκλισης.



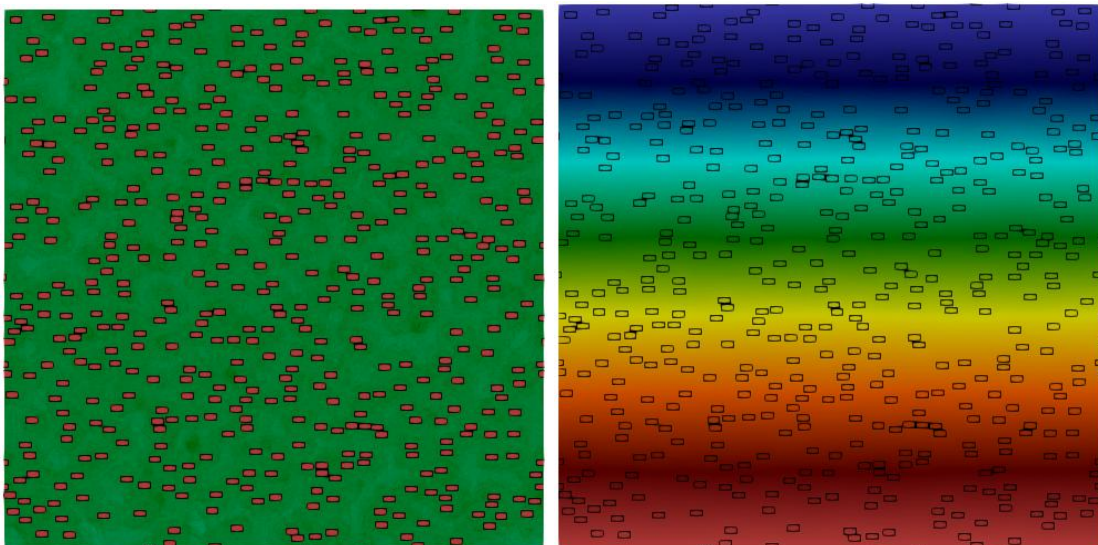
**Σχήμα Α.2:** Αποτελέσματα *Richardson Extrapolation*. Οι διακεκομμένες γραμμές αποτελούν τα όρια αποδεκτού σφάλματος  $\pm 1\%$ .

Σύμφωνα λοιπόν με το παραπάνω διάγραμμα το πυκνότερο πλέγμα με 21.000.000 υπολογιστικά κελιά ελαχιστοποιεί το σφάλμα της ανάλυσης Richardson.

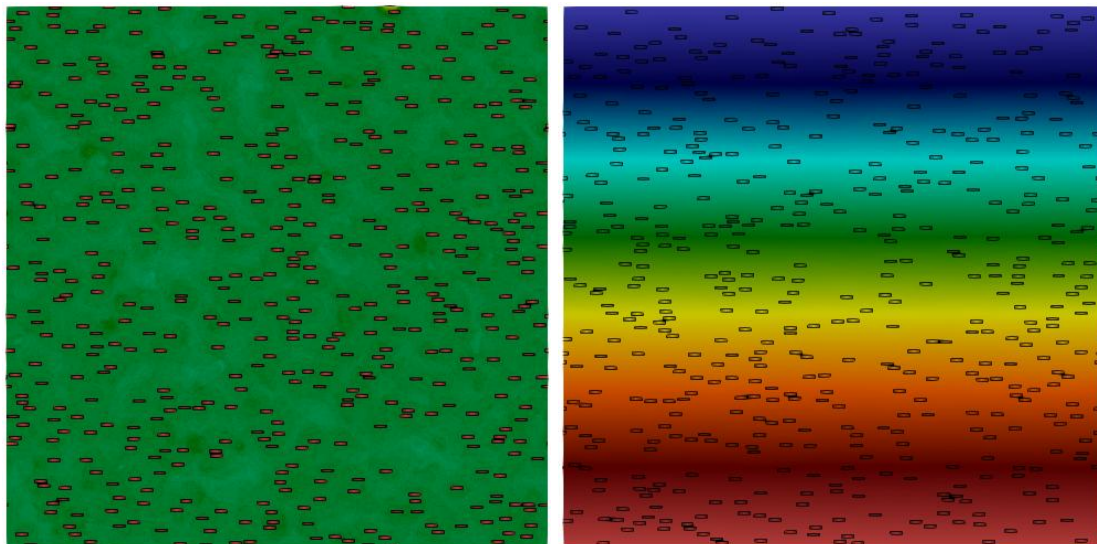
**ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β – Θερμοκρασιακά πεδία. Φωτογραφίες από Paraview.**



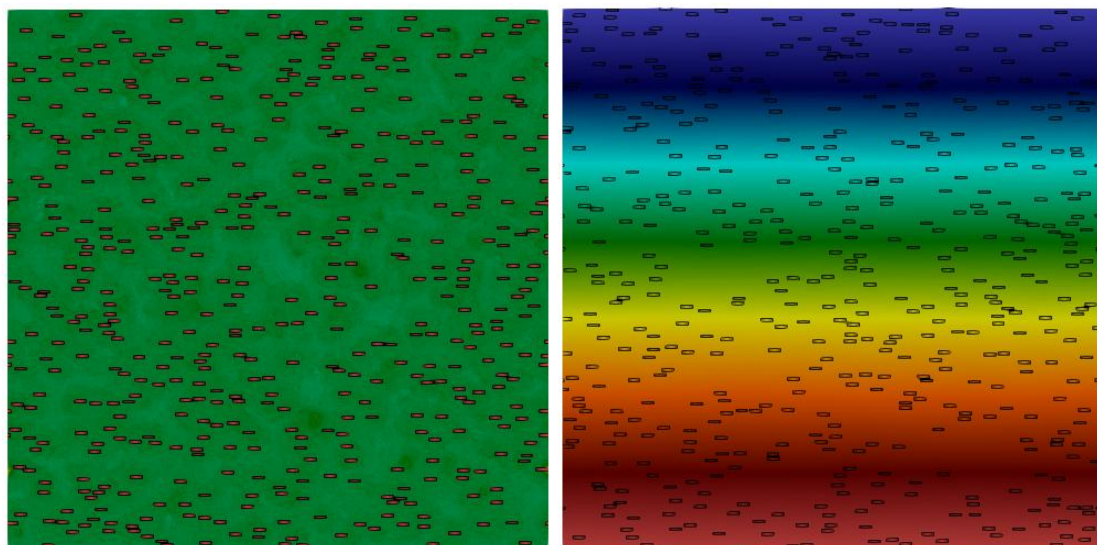
**Σχήμα Β.1:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.25$ ,  $\sigma=2$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.03$ ,  $N=500$



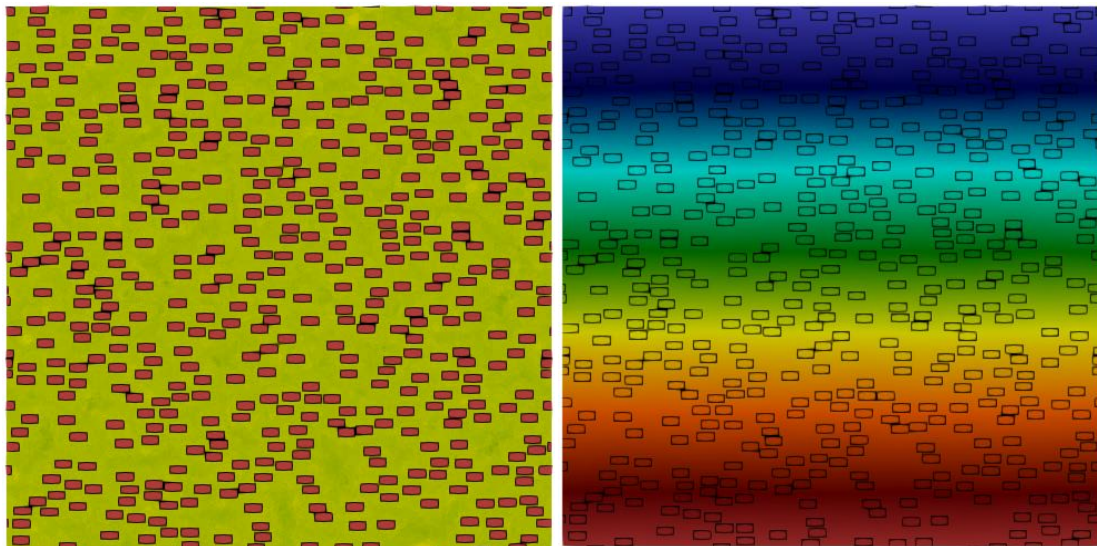
**Σχήμα Β.2:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.25$ ,  $\sigma=2$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.3$ ,  $N=500$



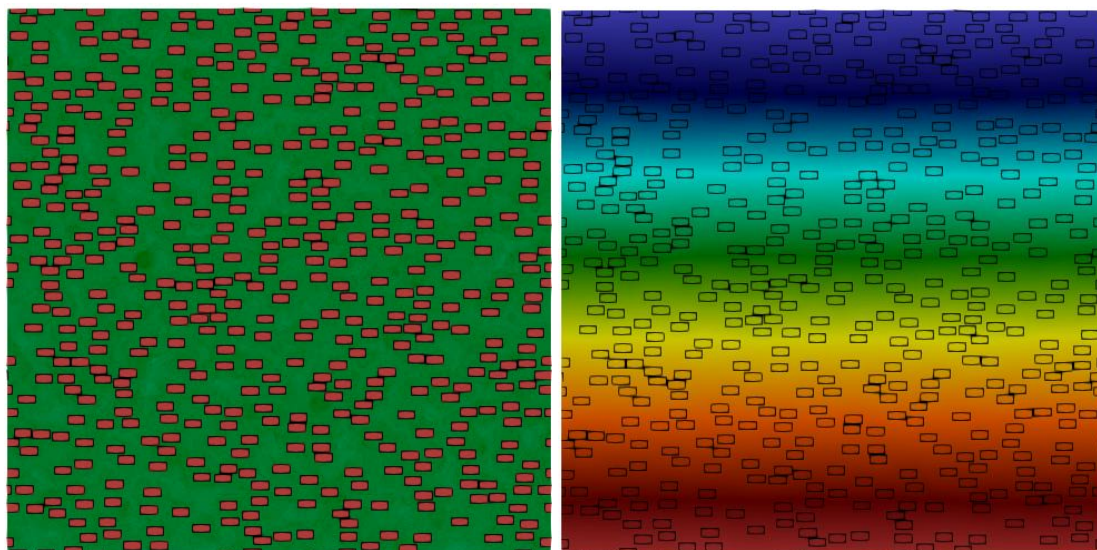
**Σχήμα Β.3:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.25$ ,  $\alpha=2$ ,  $k=10$ ,  $\text{Dist}=0.06$ ,  $N=500$



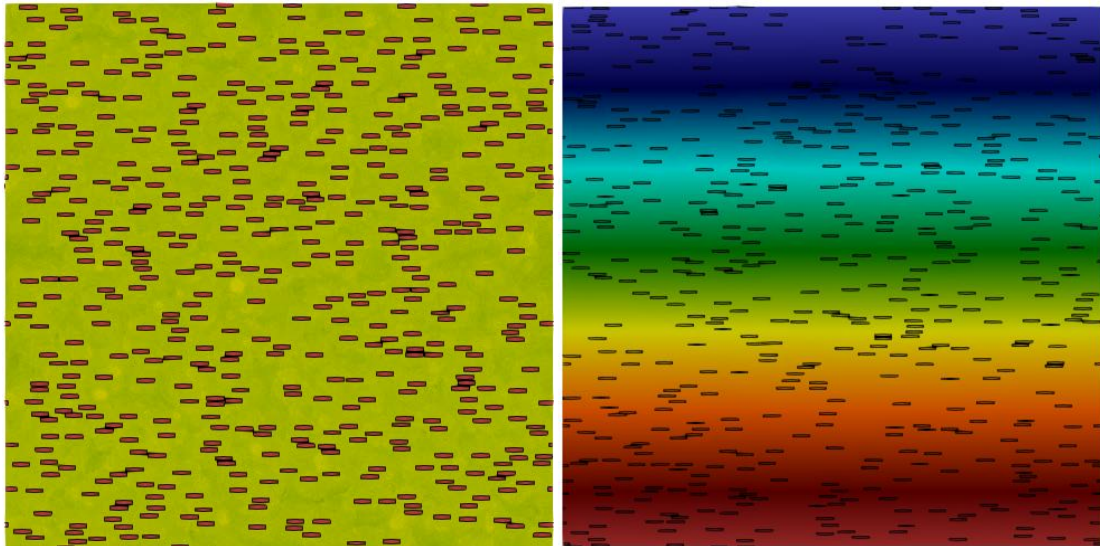
**Σχήμα Β.4:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.25$ ,  $\alpha=4$ ,  $k=4$ ,  $\text{Dist}=0.06$ ,  $N=500$



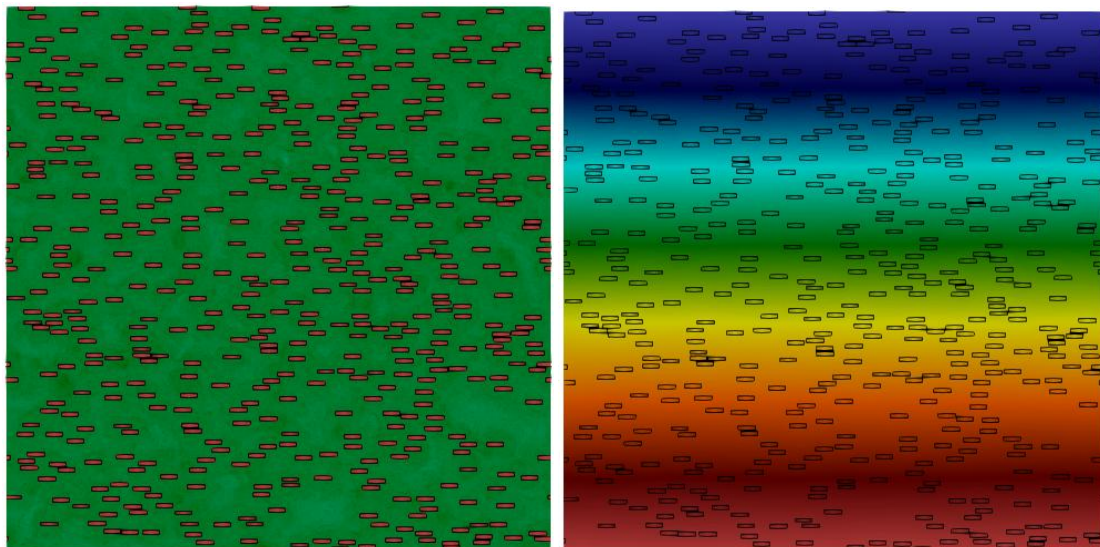
**Σχήμα Β.5:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=2$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



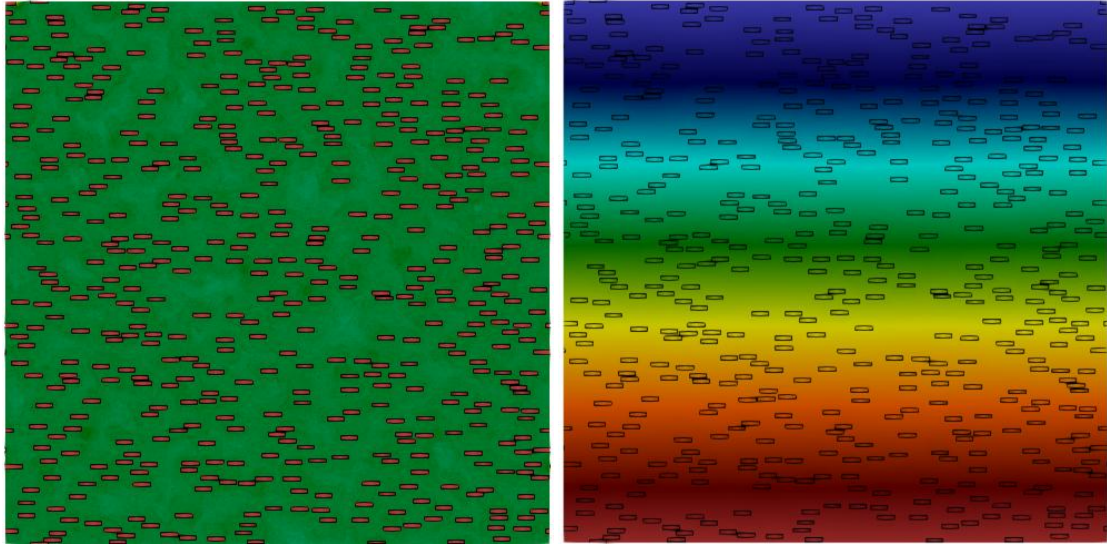
**Σχήμα Β.6:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=2$ ,  $k=10$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



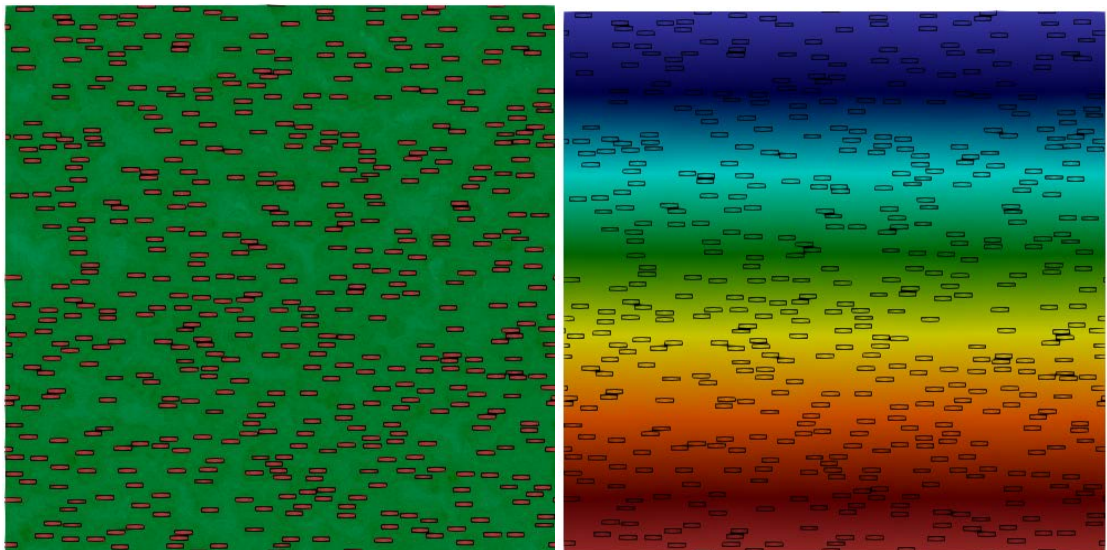
**Σχήμα B.7:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=4$ ,  $k=10$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



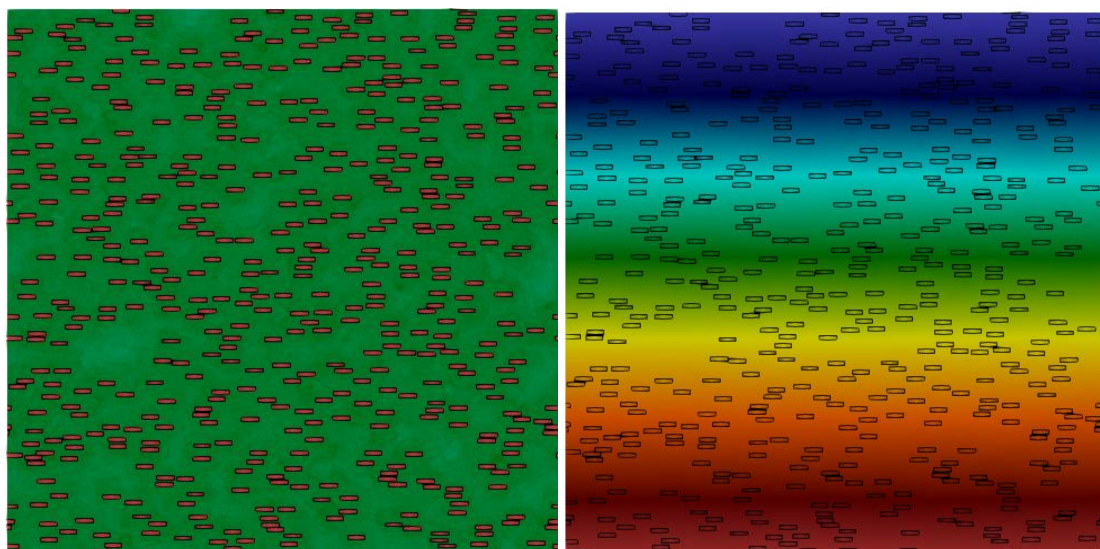
**Σχήμα B.8:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=4$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.03$ ,  $N=500$



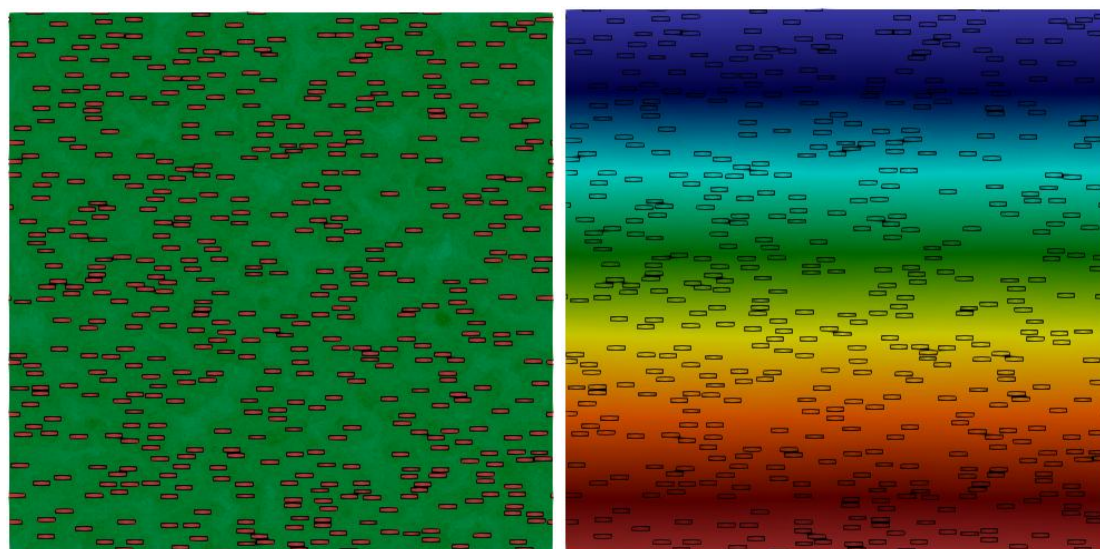
**Σχήμα B.9:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=4$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



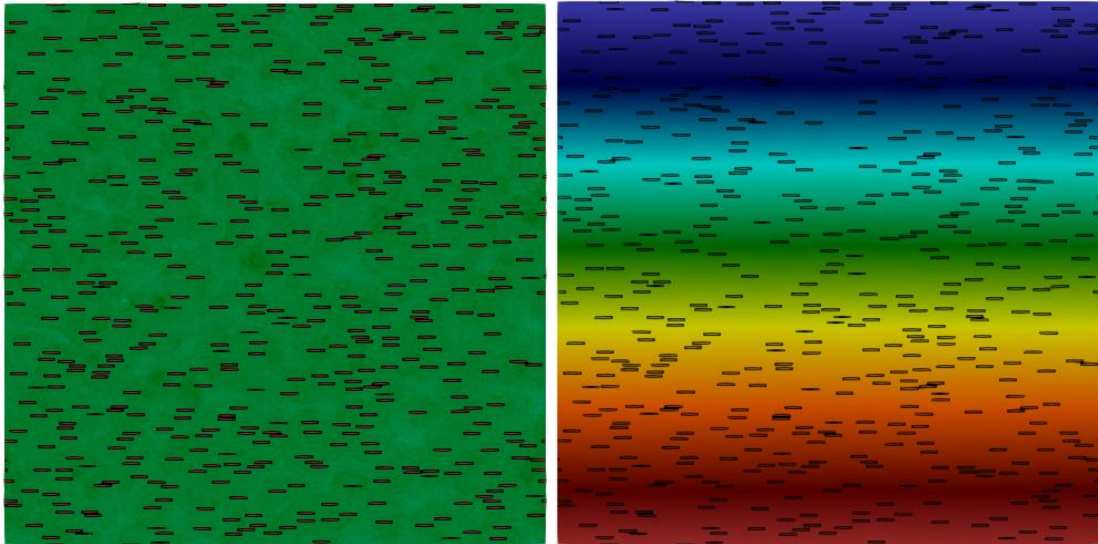
**Σχήμα B.10:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $a=4$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.09$ ,  $N=500$



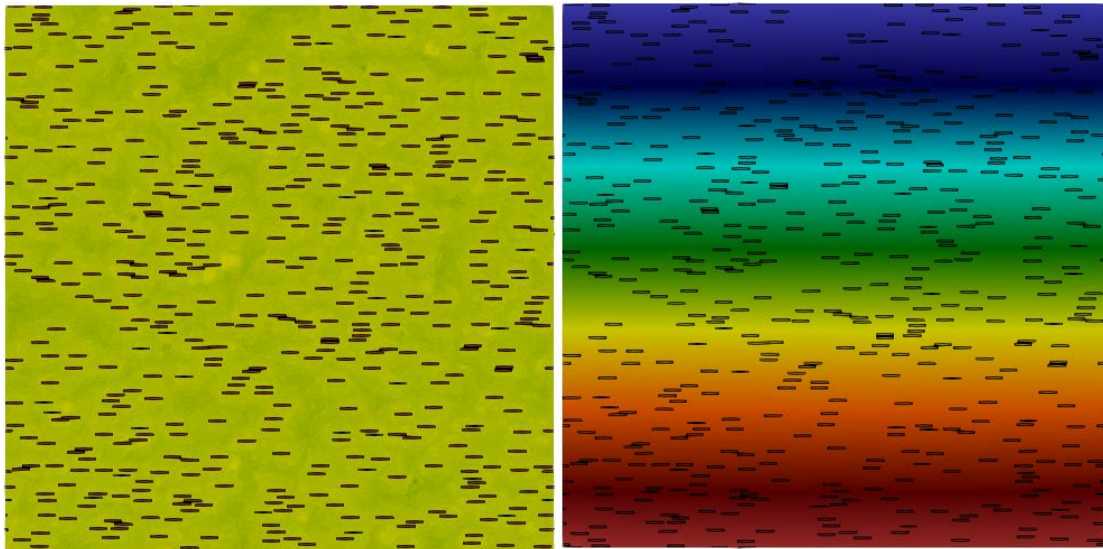
**Σχήμα B.11:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $\sigma=4$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.12$ ,  $N=500$



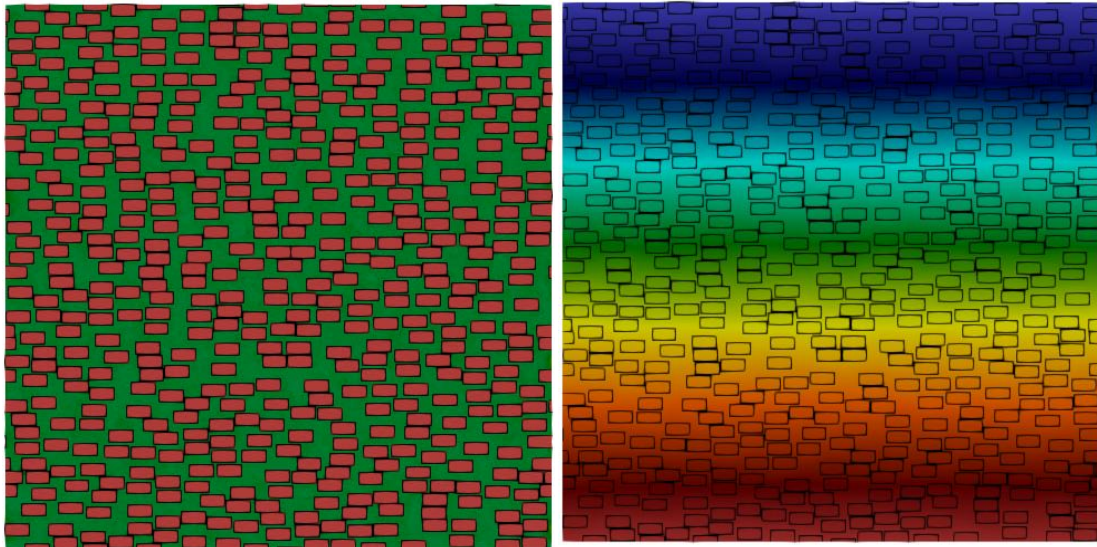
**Σχήμα B.12:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $\sigma=4$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.15$ ,  $N=500$



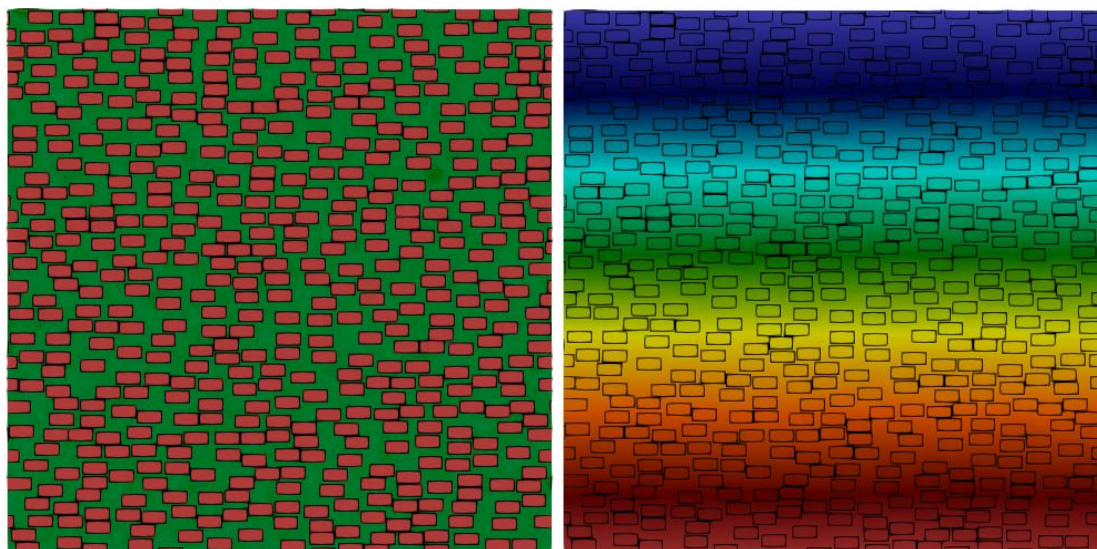
**Σχήμα B.13:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $\alpha=8$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



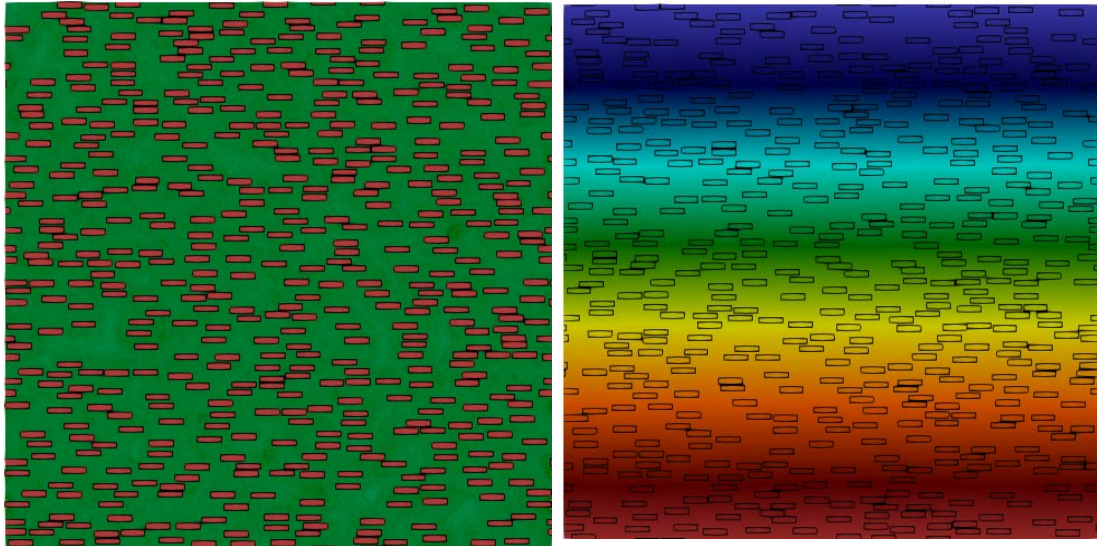
**Σχήμα B.14:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=0.5$ ,  $\alpha=8$ ,  $k=10$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



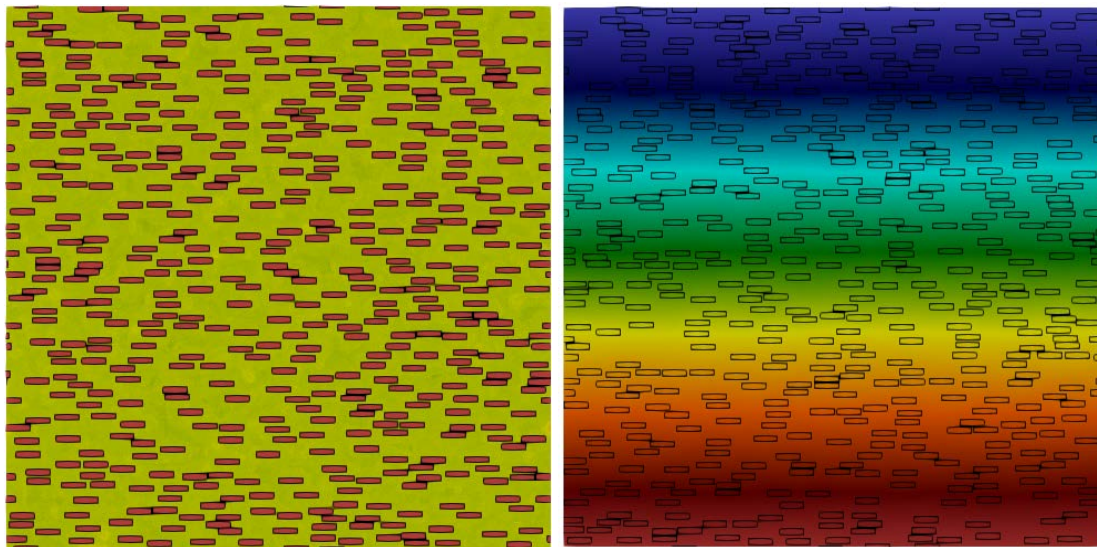
**Σχήμα B.15:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=1$ ,  $\sigma=2$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.03$ ,  $N=500$



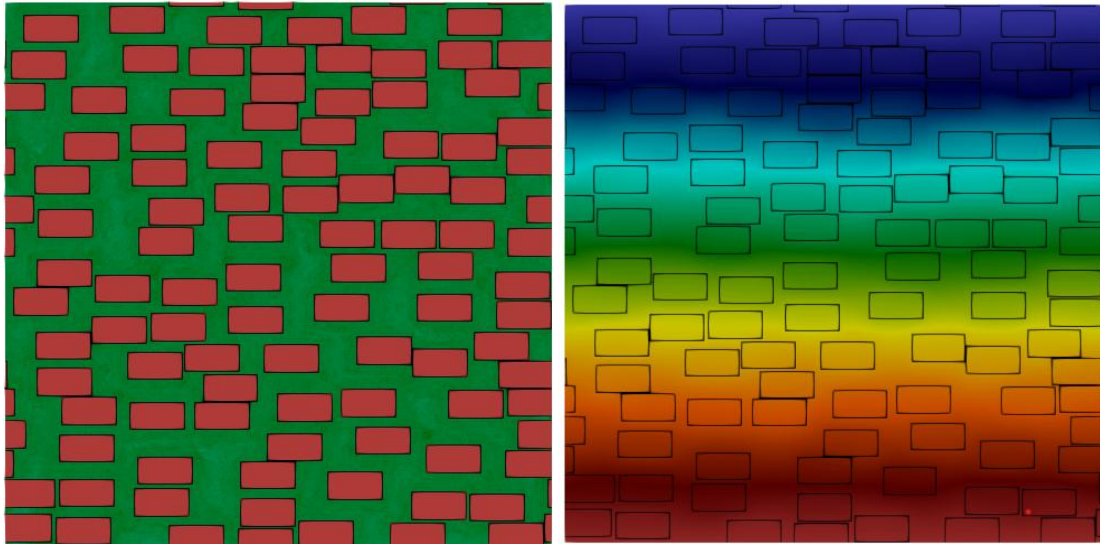
**Σχήμα B.16:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=1$ ,  $\sigma=2$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.3$ ,  $N=500$



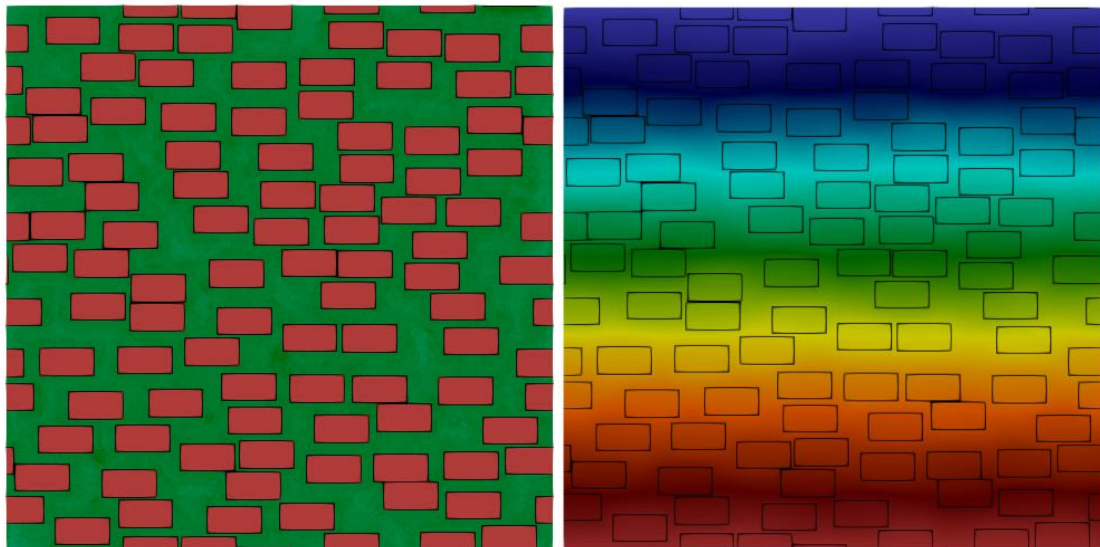
**Σχήμα B.17:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=1$ ,  $\alpha=4$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



**Σχήμα B.18:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=1$ ,  $\alpha=4$ ,  $k=10$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=500$



**Σχήμα B.19:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=1$ ,  $\sigma=2$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.06$ ,  $N=100$



**Σχήμα B.20:** πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (δεξιά) και θερμοκρασίας (αριστερά).  $\alpha\phi=1$ ,  $\sigma=2$ ,  $k=4$ ,  $Dist=0.15$ ,  $N=100$

## Βιβλιογραφία

1. A. J. Munnich & G. Chen, «Quantitative theory for interfacial thermal resistance,» *Applied Physics Letters*, τόμ. 91, αρ. 7, 2007.
2. Tsiantis, *Computational Study of Transport Phenomena in Flake Filled Composite Materials*, PhD Thesis, Volos, University of Thessaly, 2020.
3. Binnig, G., Quate, C. F., & Gerber, C. (1986). Atomic force microscope. *Physical Review Letters*, 56(9), 930–933.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.930>
4. Briggs, D., & Seah, M. P. (1990). Practical surface analysis: Auger and X-ray photoelectron spectroscopy (Vol. 1). Wiley.
5. Butt, H. J., Cappella, B., & Kappl, M. (2005). Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications. *Surface Science Reports*, 59(1–6), 1–152.  
<https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2005.08.003>
6. C. Geuzaine και J. F. Remacle, «Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre and post processing facilities,» *Numerical methods in Engineering*, τόμ. 79, αρ. 11, 2009.
7. Cahill, D. G. (2004). Analysis of heat flow in layered structures for time-domain thermoreflectance. *Review of Scientific Instruments*, 75(12), 5119–5122. <https://doi.org/10.1063/1.1819431>
8. Cahill, D. G., Braun, P. V., Chen, G., et al. (2014). Nanoscale thermal transport II 2003–2012. *Applied Physics Reviews*, 1(1), 011305.  
<https://doi.org/10.1063/1.4832615>
9. Cahill D. G., 1999 Thermal conductivity measurement from 30 to 750 K: The 3 $\omega$  method. <https://doi.org/10.1063/1.1141498>
10. Cape, J. and Lehman, G. (1963) Temperature and Finite Pulse-Time Effects in the Flash Method for Measuring Thermal Diffusivity. *Journal of Applied Physics*, 34, 1909-1913, 34(7), 1909–1913.  
<http://dx.doi.org/10.1063/1.1729711>
11. Chen, G. (2005). Nanoscale energy transport and conversion: a parallel treatment of electrons, molecules, phonons, and photons. Oxford University Press.

12. Ferrari, A. C., & Basko, D. M. (2013). Raman spectroscopy as a versatile tool for studying the properties of graphene. *Nature Nanotechnology*, 8(4), 235–246. <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.46>
13. Ferry, J. D. (2001). *Viscoelastic Properties of Polymers*. Wiley.
14. Ghosh, S., Bao, W., Nika, D. L., et al. (2010). Dimensional crossover of thermal transport in few-layer graphene. *Nature Materials*, 9(7), 555–558. <https://doi.org/10.1038/nmat2753>
15. Gogotsi, Y., & Presser, V. (2013). *Carbon Nanomaterials*. CRC Press.
16. Goldstein, J., Newbury, D. E., Joy, D. C., Lyman, C. E., Echlin, P., Lifshin, E., Sawyer, L., & Michael, J. R. (2017). *Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-4939-6676-9>
17. Shahil, K. M. F., & Balandin, A. A. (2012). Thermal properties of graphene and multilayer graphene: Applications in thermal interface materials. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.04.034>
18. X. Wang, J. Zhao, E. Cui, X. Tian, Z. Sun, 2021. Effect of Interfacial Structure on Mechanical Properties of Graphene Reinforced Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–WC Matrix Ceramic Composite. <https://doi.org/10.3390/nano11061374>
19. Gururaja Udupa, S. Shrikantha Rao, K.V. Gangadharan, “Functionally Graded Composite Materials: An Overview”, 2014.
20. Hopkins, P. E. (2013). Thermal transport across solid interfaces with nanoscale imperfections: Effects of roughness, disorder, dislocations, and bonding on thermal boundary conductance. *ISRN Mechanical Engineering*, 2013, 682586. <https://doi.org/10.1155/2013/682586>
21. J.-K. Kim, Y.-W. Mai. Characterization of interfaces. *Engineered interfaces in fiber reinforced composites*, Elsevier (1998) <https://doi.org/10.1016/B978-008042695-2/50003-8>
22. Kim, H., Abdala, A. A., & Macosko, C. W. (2010). Graphene/polymer nanocomposites. *Macromolecules*, 43(16), 6515–6530. <https://doi.org/10.1021/ma100572e>
23. Kuilla, T., Bhadra, S., Yao, D., Kim, N. H., Bose, S., & Lee, J. H. (2010). Recent advances in graphene-based polymer composites. *Progress in Polymer Science*, 35(11), 1350–1375. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2010.07.005>
24. Majumdar, A. (1993). Microscale heat conduction in dielectric thin films. *Journal of Heat Transfer*, 115(1), 7–16. <https://doi.org/10.1115/1.2910673>

25. Mittal, V. (2011). Optimization of Polymer Nanocomposite Properties. Wiley-VCH.
26. Ostoja-Starzewski, M. (2006). Material spatial randomness: From statistical to representative volume element. Probabilistic Engineering Mechanics, 21(2), 112–132. <https://doi.org/10.1016/j.pro bengmech.2005.07.007>
27. Pérez-Bustamante, R., Bolaños-Morales, D., Bonilla-Martínez, J., Flores-Campos, R., & Estrada-Guel, I. (2014). Microstructural and hardness behavior of graphene–nanoplatelets/aluminum composites synthesized by mechanical alloying. *Journal of Alloys and Compounds*, 615, S578–S582.. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.01.225>
28. Prasher, R. (2006). Thermal interface materials: Historical perspective, status, and future directions. Proceedings of the IEEE, 94(8), 1571–1586. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2006.879796>
29. Plueddemann, E. P. (1991). Silane coupling agents. Springer Science & Business Media.
30. Rasheedat M. Mahamood, Esther T. Akinlabi, Mukul Shukla, Sisa Pityana, “Functionally Graded Material: An Overview”, 2012.
31. Shahil, K. M. F., & Balandin, A. A. (2012). Graphene–multilayer graphene nanocomposites as highly efficient thermal interface materials. Nano Letters, 12(2), 861–867. <https://doi.org/10.1021/nl203906r>
32. Smith, B. C. (2011). Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy. CRC Press.
33. Swartz, E. T., & Pohl, R. O. (1989). Thermal boundary resistance. Reviews of Modern Physics, 61(3), 605–668. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.605>
34. V. Prasad, M.A. Joseph, K. Sekar. Investigation of mechanical, thermal and water absorption properties of flax fibre reinforced epoxy composite with nano TiO<sub>2</sub> addition, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2018.09.031>
35. Han, Y., Ben, L., Yao, J., & Wu, C. (2015). Microstructural characterization of Cu/Al composites and effect of cooling rate at the Cu/Al interfacial region. International Journal of Minerals, Metallurgy, and Materials, 22, 1027–1034 <https://doi.org/10.1007/s12613-015-1048-4>
36. Williams, D. B., & Carter, C. B. (2009). Transmission electron microscopy: A textbook for materials science. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-76501-3>

37. Mortazavi, B., & Rabczuk, T. (2015). Multiscale modeling of heat conduction in graphene laminates. *Carbon*, 85, 1–17.  
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2014.12.046>
38. Y. A. Cengel και A. J. Ghajar, *Heat and Mass Transfer -Fundamentals and Applications*, New York: McGraw - Hill Education, 2015.
39. Kunpeng Ruan , Xuetao Shi , Yongqiang Guo, Junwei Gu (2018). Interface thermal resistance in nanocomposites: A review. *Composites Science and Technology*, 168, 125–133. <https://doi.org/10.1016/j.coco.2020.100518>
40. Yu Wang, Chunhui Yang, Qing-Xiang Pei, Yingyan Zhang Zhu, J., Wei, N., Li, Q., Chen, Y., & Shi, S. (2016). Some Aspects of Thermal Transport across the Interface between Graphene and Epoxy in Nanocomposites. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 8(31), 21049–21055.  
<https://doi.org/10.1021/acsami.6b00325>
41. Γ. Παπανικολάου, Μουζάκης, “*Σύνθετα υλικά*”, εκδόσεις Κλειδάριθμος, 2007
42. Κ. Παναγιώτου, Θεσσαλονίκη 2000, “*Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών*”