复合材料学报 Acta Materiae Compositae Sinica
第29卷 第6期 12月 2012年
Vol. 29 No. 6 December 2012

文章编号：1000-3851(2012)06-0144-08

纳米粒子在SiC/PTFE复合材料中分散三维仿真与分形表征

王 玲*，何春霞
（南京农业大学 工学院，江苏省高等学校智能化农业装备重点实验室，南京 210031）

摘 要： 为了从理论上探讨纳米粒子在基体材料中的分布规律，以纳米SiC质量分数为3%、5%、7%、9%的SiC/PTFE(聚四氟乙烯)复合材料为例，根据纳米SiC的半径(25 nm)、密度(3.2 g/cm^3)、质量分数和基体材料的密度(2.2 g/cm^3)，以10^{-12} g为质量单位、25 nm∶1像素为比例尺，建立了纳米粒子在基体中均匀/偏聚分布的三维仿真模型，基于其盒维数定量表征了不同团聚/偏聚程度的纳米粒子的分散度，并进行了力学实验验证。结果表明：均匀分布下随着纳米SiC粒子半径的不断增加，或体积分数的不断减小，其盒维数也逐渐减小；当SiC粒子半径超过100 nm时，不再具有分形特性。偏聚分布下随着纳米SiC粒子(半径为50 nm)间距的不断加大，或体积分数的不断减小，或层状、线状、团状分布的依次改变，其盒维数也逐渐减小；相同体积分数下偏聚分布的盒维数低于均匀分布；当粒子间距超过450 nm时，不再具有分形特性。均匀分布下纳米SiC/PTFE复合材料的力学性能测试结果与其三维仿真模型的盒维数线性相关($|R|>0.9$)。盒维数可定量表征纳米粒子的分散度，并可用于预测纳米复合材料的宏观性能。

关键词： 纳米SiC/PTFE复合材料；三维仿真；均匀分布；偏聚分布；盒维数；力学性能
中图分类号： TB330.1；TP391.9 **文献标志码：** A

3D simulation and fractal characterization of nano particles dispersion in SiC/PTFE composites

WANG Ling*, HE Chunxia
(Key Laboratory of Intelligent Agricultural Equipment of Higher Education Institute in Jiangsu Province, College of Engineering, Nanjing Agricultural University, Nanjing 210031, China)

Abstract: To study the distribution regularity of nano particles in matrix material theoretically, SiC/PTFE(Poly Tetra Fluoro Ethylene) composites with SiC mass fraction of 3%, 5%, 7% and 9% were used as examples. According to the radius (25 nm), the density (3.2 g/cm^3), mass fraction of SiC particles and the density of PTFE matrix material(2.2 g/cm^3), 3D simulation models of uniform/deviation distributed nano particles in matrix material were established with 10^{-12} g for quality unit and to 25 nm∶1 pixel for the scale. Based on box dimensions, dispersions of various cluster/deviation nano particles were characterized quantitatively and verified by mechanical experiment. Experimental results indicate that the box dimension of SiC particles decreases gradually in uniform distribution with the continuous increment of their radius, or the decrement of their volume fractions, and fractal characteristics doesn't exist in the case of their radius above 100 nm. In another hand, the box dimension of SiC particles (50 nm for radius) decreases gradually in deviation distribution with the continuous increment of their span, or the decrement of their volume fractions, or varying of their distribution from layer and line to reunion, which is less than that in uniform distribution with the same volume fraction, and fractal characteristics doesn't exist in the case of their span beyond 450 nm. Linear correlations ($|R|>0.9$) are observed between test results of mechanical properties of SiC/PTFE composites and box dimensions of their 3D simulation models in uniform distribution. Dispersions of nano particles can be characterized quantitatively using box dimension, which can be used to predict macroscopic properties of composites.

收到初稿日期： 2011-10-23；**收到修改稿日期：** 2012-03-16；**网络出版时间：** 2012-08-02 13:18:50
网络出版地址： www.cnki.net/kcms/detail/11.1801.TB.20120802.1318.047.html
基金项目： 中央高校基本科研业务费专项基金(KYZ200921)；高等学校博士点基金(20060307002)
通讯作者： 王 玲，博士，副教授，从事图像处理与模式识别 E-mail：Lingw@njau.edu.cn

Keywords：nano SiC/PTFE composite；3D simulation；uniform distribution；deviation distribution；box dimension；mechanical property

无机粒子是聚合物的重要改性材料[1-4]，常规微米级粒子与基体结合较差，纳米粒子表面积大，表面活性中心多，在与基体大分子链之间较强的范德华力作用下紧密结合基体，能较好地传递所承受的外应力，从而对基体进行增韧、增强。近年来，纳米粒子因其优异性能已成为 PTFE(聚四氟乙烯)及聚合物性能改性的重要材料[5]，无机纳米粒子聚合物复合材料能综合无机粒子的刚性、热稳定性、尺寸稳定性和聚合物的韧性、减摩性、易成型加工等特点，使复合材料具有优良的力学性能、热性能及加工性能。

材料的微观结构决定了材料的宏观性能，获取材料三维微观结构的方法有：(1)体视学法，利用光学/扫描电镜由二维截面间接推测三维参数；(2)三维重建法，对系列金相截面的计算开销太大；(3)体积元法，表示规则、周期性的分布，无法研究颗粒空间分布对材料性能的影响。计算机仿真技术为研究材料的微观结构提供了一条有效途径。秦湘阁等[6-8]用蒙特卡罗法模拟晶粒的长大过程，并对不同形状、尺寸、体积分数和空间分布的颗粒增强复合材料进行了三维建模。潘琼瑶等[9]建立了颗粒增强复合材料三维随机模型，并结合有限元软件分析了颗粒体积分数、大小及分布形态对复合材料热膨胀性能的影响。孙永立等[10]在金相显微图像上发现 4 种陶瓷颗粒在镍合金基体中的二维分维数随着含量的增加或直径的减小而增加，与陶瓷颗粒种类无关。何飞等[11]利用经典 FHH 方程计算了 SiO_2 干凝胶的表面分形维数。聂鹏等[12]以纳米复合材料透射电镜(TEM)图像中心为圆心，对圆内粒子数与回转半径进行直线拟合提取分形维数。Woignier 等[13]发现纳米硅/气凝胶复合材料的两种鳞片状结构中，有机硅氧烷聚合物具有分形结构，硅粒子形成的大鳞片分形结构与较低的韦伯分布参数有关。Sarkisov 等[14]用纳米复合材料纹理二维流明场能量谱的自相似性计算盒维数，并基于盒维数的等高线估计复合材料纹理聚集生长的速度和方向。Li 等[15]合成聚合物复合材料时发现，蒙脱石单体的聚集具有分形特性，分形形态可反映单体的聚合程度。Amir 等[16]发现纳米复合材料聚合物电解膜生长时具有分形特性，对有限扩散的聚集过程进行了布朗运动分形模拟，并比较了二者的盒维数。目前，尚未见纳米粒子聚合物复合材料三维微观结构的定量研究报道，本文作者以纳米 SiC/PTFE 复合材料为例，对纳米复合材料粒子的实际分布进行三维仿真，建立不同质量分数(<10%)的纳米粒子在基体中均匀/偏聚分布的三维模型，并以分形维数为数学模型，定量表征不同团聚/偏聚程度的纳米复合材料粒子的分散程度，从理论上探讨纳米粒子在基体材料中的分布规律，为基于透射电镜图像定量表征纳米复合材料粒子的实际分布提供理论依据。

1　研究方法

1.1　三维仿真

纳米复合材料的三维微观结构是指粒子的形状、尺寸、体积分数和空间分布等，研究表明，由于布朗运动的随机性，粒子团聚的形状无规则[17]，分形维数与粒子形状无关[10]，可将纳米粒子及其团聚视为尺寸不同的球体。

粒子的空间分布理论上可视为完全随机分布(均匀分布)和不完全随机分布(偏聚分布)。若粒子坐标(x，y，z)由随机数发生器产生，其中，均匀分布的粒子坐标在 x、y、z 轴上产生(见式(1))，偏聚分布分为层状、线状和团状，层状分布中各层上的粒子坐标在 x、y 轴和 dz 上产生(见式(2))，线状分布中每条线上的粒子坐标在 x 轴和 dy、dz 上产生(见式(3))，团聚分布中每个团上的粒子坐标在 dx、dy、dz 上产生(见式(4))。

$$x = \mathrm{rand}(0, X_m), y = \mathrm{rand}(0, Y_m), z = \mathrm{rand}(0, Z_m) \tag{1}$$

$$x = \mathrm{rand}(0, X_m), y = \mathrm{rand}(0, Y_m), z = z_k + \mathrm{rand}(\mathrm{d}z) \tag{2}$$

$$x = \mathrm{rand}(0, X_m), y = y_j + \mathrm{rand}(\mathrm{d}y), z = z_k + \mathrm{rand}(\mathrm{d}z) \tag{3}$$

$$x = x_i + \mathrm{rand}(\mathrm{d}x), y = y_j + \mathrm{rand}(\mathrm{d}y), z = z_k + \mathrm{rand}(\mathrm{d}z) \tag{4}$$

式中：X_m、Y_m 和 Z_m 为三维坐标的最大值；dx、dy 和 dz 为三个坐标轴上的偏差；i，j，k=1，2，…，n。

1.2　分形模型

考虑 R^n 中 r 为一坐标网立方体：$[m_1 r, (m_1+1)r] \times \cdots \times [m_n r, (m_n+1)r]$，其中 m_1、…、

m_n 均为整数。设 F 是 R^n 上任意非空的有界子集，$N_r(F)$是与 F 相交的边长为 r 的网立方体的个数，则 F 的盒维数定义为

$$\mathrm{Dim}_{\mathrm{B}}F=\lim_{r\to 0}\frac{\lg N_r(F)}{-\lg r} \tag{5}$$

为了计算一个立体集 F 的盒维数，可以构造一些边长为 r 的立方体(盒子)，并计算不同 r 值的“盒子”和 F 相交的个数 $N_r(F)$。盒维数就是，当 $r\to 0$ 时，$N_r(F)$增加的对数速率，可以由函数 $\lg N_r(F)$相对于$-\lg r$ 图的斜率值来估计，它反映了 F 集的不规则性是如何迅速表现出来的。

纳米复合材料三维仿真模型的盒维数的估计方法为：假设复合材料为全零三维矩阵，分布于其中的纳米粒子为全 1 球体，用边长为 1、2、2^2、…的立方体度量三维矩阵，统计包含纳米粒子的立方体的个数 $N(r)$，作出 $N(r)$与 r 的双对数图，并基于线性回归求取盒维数 $D=\lg N(r)/\lg(r)$，拟合系数为 R。

2　仿真结果与分析

2.1　仿真数据及边界条件

胡卫峰等[17]根据微粒子在流体中的布朗运动模拟纳米粒子在流体中的聚集过程，分形凝聚体非常开放，具有较小的分维数，随着时间的增加，粒子团数减至很少时不具有分维数，因而模拟时要设置合适的系统尺度、时间步长和聚集时间。以此为鉴，纳米复合材料三维仿真时也须设置复合材料的边长以及纳米粒子的半径、数量和分布。

考虑到 Matlab 软件处理三维矩阵时，矩阵的大小限制在 256×256×256 以内，可据此确立仿真数据的边界条件。假设复合材料的边长(side)为 8、16、32、64、128、256，随机均匀分布的纳米粒子为 1 个点(半径 $r=0$)，计算纳米粒子占复合材料的体积分数 $v=10\%\sim100\%$之间的盒维数 D 和拟合系数R(见图 1)。结果表明，$v=100\%$时，$D=3$；边长固定时，D 和 R 随着 v 的增加而增大；v 固定时，D 和 R 随着边长的增加而增大。为了获得较高的 R，应选用尽可能大的复合材料边长。

以纳米 SiC/PTFE 复合材料为例，根据纳米 SiC 粒子的半径(25 nm)、密度(3.2 g/cm^3)及其质量分数(3%、5%、7%、9%)以及 PTFE 基体材料的密度(2.2 g/cm^3)，计算基体材料和纳米粒子的体积，以获取复合材料的边长以及纳米粒子的半径和数量。以 25 nm∶1 像素为比例尺进行尺寸压缩，

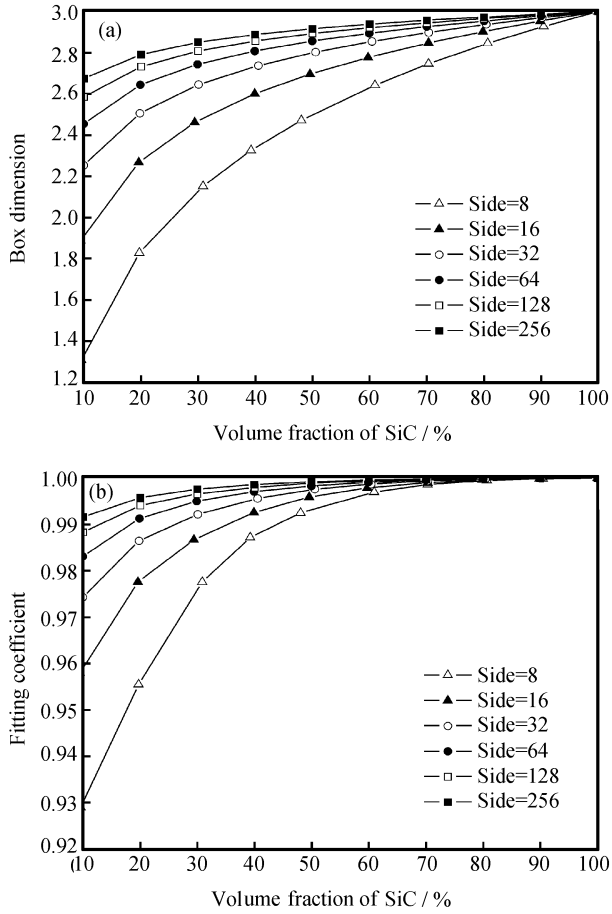


图 1　不同边长时均匀分布的纳米 SiC/PTFE 复合材料三维仿真模型的盒维数及其拟合系数与 SiC 体积分数的关系

Fig. 1　Relationship of box dimension and fitting coefficient of 3D simulation model of uniform distributed nano SiC/PTFE composites with volume fraction of SiC at different sides

以表征单个纳米粒子球体，以 10^{-12} g 为质量单位以获取尽可能大的复合材料边长。例如，对于质量分数为 3%的纳米复合材料，纳米粒子和基体材料的质量为 3×10^{-12} g 和 97×10^{-12} g，体积为 0.09375×10^{10} nm^3 和 4.4091×10^{10} nm^3，则复合材料的边长为 3557 nm，以 25 nm∶1 像素为比例尺可压缩为 143×143×143 的三维矩阵。同时，可计算出质量分数为 3%、5%、7%、9%的纳米粒子所对应的体积分数分别为 2.08%、3.49%、4.92%、6.37%。

模拟运行环境为 Intel (R) core(TM)2 Duo CPU E7500@2.93 GHz，2.93 GHZ，2 GB。

2.2　均匀分布下不同团聚程度的纳米粒子

根据纳米粒子的体积分数 v、半径 r 计算其粒子数 n，绘制纳米粒子在基体中均匀分布的三维仿真模型，并生成其数据矩阵，计算其盒维数，具体

步骤如下：

（1）建立三维坐标系[0：143，0：143，0：143]，并设置其网格、光照效果和透明度等参数。

（2）绘制边长为 143 的三维基体的棱线。

（3）生成 143×143×143 的全零三维基体矩阵。

（4）选定体积分数 $v\approx2\%$，不断增加粒子半径 r，绘制 n 个半径为 r 像素的纳米粒子球，球心坐标为三个坐标轴上随机生成的[1，142]之间的随机数（见式(1)），并通过距离计算函数确保球体不碰撞，球体表面由 60 个碎片拼接而成（见图 2）。

（5）在三维基体矩阵中，将图 2 中位于球体内的像素点置为 1，生成三维复合材料矩阵，并将其零扩充至 256×256×256，计算其盒维数 D。

（6）不断增加体积分数（<10%），重复步骤(4)～(5)，总耗时 22.53 h（见表 1）。

（7）重复步骤(4)～(6)四遍。

结果表明，随着纳米粒子团聚程度的不断加大或体积分数的不断减小，复合材料微观结构的盒维数越来越小；粒子团聚到一定程度后不再具有分形特性（见图 3）。

$r\leqslant4$(100 nm)时，重复五遍获取的盒维数稳定。体积分数固定时，其盒维数随着半径的增加而减小；半径固定时，其盒维数随着体积分数的增加而增大。对图中数据点进行以下曲线拟合：半径 r 为 0、1、2、3、4 时的拟合函数分别为 $D=0.2544\times\ln v+3.0108$、$D=0.2825\times\ln v+3.0277$、$D=0.2969\times\ln v+2.9917$、$D=0.2898\times\ln v+2.9132$、$D=0.2765\times\ln v+2.8567$，$R^2=0.999$。根据 SiC 粒子在 SiC/PTFE 复合材料中的质量分数（3%、5%、7%、9%）所对应的体积分数（2.08%、3.49%、4.92%、6.37%）计算其盒维数 D（见表 2）。相关分析表明，不同团聚程度的纳米粒子在基体材料中的三维仿真模型的盒维数之间的相关系数均为 1。

$r>4$(100 nm)时，重复五遍获取的盒维数均不稳定，复合材料微观结构不具有分形特性（与文献[17]吻合），直至 $r=4$(100 nm)时盒维数才趋于稳定。

2.3　偏聚分布下不同偏聚程度的纳米粒子

根据纳米粒子的体积分数 v、半径 r 计算其粒子数 n，绘制纳米粒子在基体中偏聚分布的三维仿真模型，并生成其数据矩阵、计算其盒维数。参考

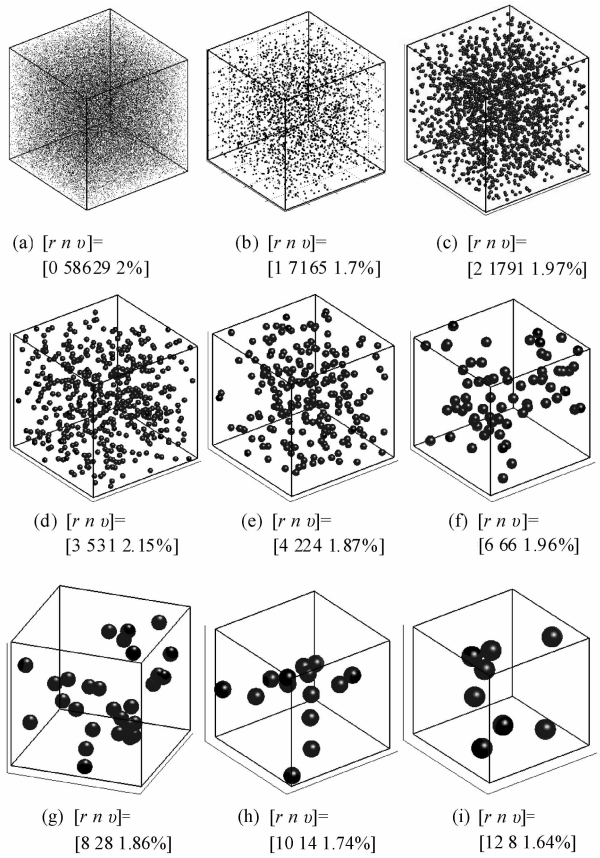


图 2　均匀分布下 n 个半径为 r 的纳米粒子在 SiC/PTFE 复合材料中的三维仿真模型

Fig. 2　3D simulation model of n uniform distributed nano particles with an radius of r in SiC/PTFE composites

表 1　均匀分布下建立纳米 SiC/PTFE 复合材料三维仿真模型的时间

Table 1　Time for established 3D simulation models of uniform distributed nano SiC/PTFE composites

Radius/pixel	Number of nano particle	Time/h
0	58629，87806，117088，146131，175149，204236，233417	0.02
1	7165，11464，14331，21496，28662，35827	16.19
2	1791，2686，3582，4477，5373，6268，7164	4.26
3	531，796，1062，1327，1593，1858，2124	1.26
4	224，336，448，560，672，784，896	0.53
6	66，99，132，165，198，231，264	0.16
8	28，42，56，70，84，98，112	0.07
10	14，21，28，35，42，49，56	0.03
12	8，12，16，20，24，28，32	0.02

2.2 节第(6)步不同半径下建模和计算的总耗时，考虑到计算开销，选用 $r=2$(50 nm)进行如下仿真

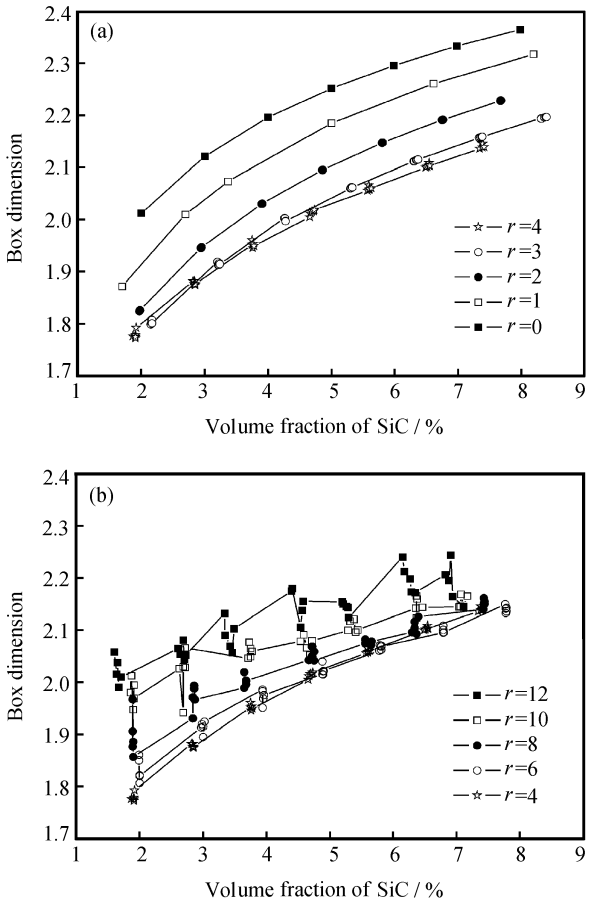


图 3　均匀分布下纳米 SiC/PTFE 复合材料三维仿真模型的盒维数与 SiC 体积分数、粒子半径的关系

Fig. 3　Relationship of box dimension of 3D simulation model of uniform distributed nano SiC/PTFE composite with volume fraction and particle radius of SiC

表 2　均匀分布的不同 SiC 质量分数纳米 SiC/PTFE 复合材料三维仿真模型盒维数

Table 2　Box dimension of 3D simulation model of uniform distributed nano SiC/PTFE composite with different mass fraction of SiC

Radius/pixel	3%	5%	7%	9%
0	2.0256	2.1572	2.2446	2.3115
1	1.9336	2.0798	2.1763	2.2494
2	1.8419	1.9955	2.0969	2.1737
3	1.7909	1.9408	2.0398	2.1148
4	1.7859	1.9290	2.0234	2.0949

实验。其他半径下的建模和计算结果各异，这里不再赘述。具体步骤如下：

(1) 建立三维坐标系[0∶143，0∶143，0∶143]，并设置其网格、光照效果和透明度等参数。

(2) 绘制边长为 143 的三维基体的棱线。

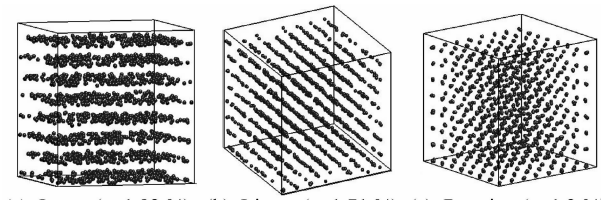
(3) 生成 143×143×143 的全零三维基体矩阵。

(4) 选定体积分数 $v\approx2\%$，绘制 $n=1791$ 个半径 $r=2$ 的纳米粒子球。层状分布下，球心坐标为 x、y 轴上随机生成的[1，142]之间的随机数以及 z 轴上随机生成的[−1，1]之间的随机数＋层坐标 z_k（见式(2)，$z_1=4$），层间距$(d)=z_2-z_1=18$，层厚 $dz=3$（见图 4）；线状分布下，球心坐标为 x 轴上随机生成的[1，142]之间的随机数以及 y、z 轴上随机生成的[−1，1]之间的随机数＋线坐标（y_j，z_k）（见式(3)，$y_1=z_1=4$），线间距$(d)=y_2-y_1=18$，线宽 $dy=dz=3$；团状分布下，球心坐标为 x、y、z 轴上随机生成的[−1，1]之间的随机数＋团坐标（x_i，y_j，z_k）（见式(4)，$x_1=y_1=z_1=4$），团间距$(d)=x_2-x_1=18$，团宽 $dx=dy=dz=3$；球体表面由 60 个碎片拼接而成。

(5) 在三维基体矩阵中，将图 4 中位于球体内的像素点置为 1，生成三维纳米复合材料矩阵，并将其零扩充至 256×256×256，计算其盒维数 D。

(6) 不断增加 SiC 体积分数(<10%)，并不断改变 d，重复步骤(4)～(5)。三种分布在 $n=\{1791, 2686, 3582, 4477, 5373, 6268, 7164\}$并且 $d=\{8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 26, \cdots\}$ 时，总耗时 3×10×4.18 h(5.225 天)。另外，团状分布在$n=1791$时要求 $d\geqslant12$，这样，基体中至多需要$(143/12)^3=1728$ 个粒子方能充满。

(7) 改变纳米粒子的起始坐标 x_1、y_1、z_1 重复步骤(4)～(6)。



(a) Layer (v=1.92 %)　(b) Linear (v=1.71 %)　(c) Reunion (v=1.2 %)

图 4　偏聚分布下 1791 个半径为 2、间距为 18 的纳米粒子在 SiC/PTFE 复合材料中的三维仿真模型

Fig. 4　3D simulation model of 1791 deviation distributed nano particles with an radius of 2 and an span of 18 in SiC/PTFE composites

结果表明，纳米粒子的偏聚程度随着间距的增加或层状、线状、团状分布的改变而不断加大，其体积分数由于团聚不断减小，复合材料微观结构的盒维数也越来越小，同比低于均匀分布；粒子偏聚到一定程度后不再具有分形特性，如图 5 所示。

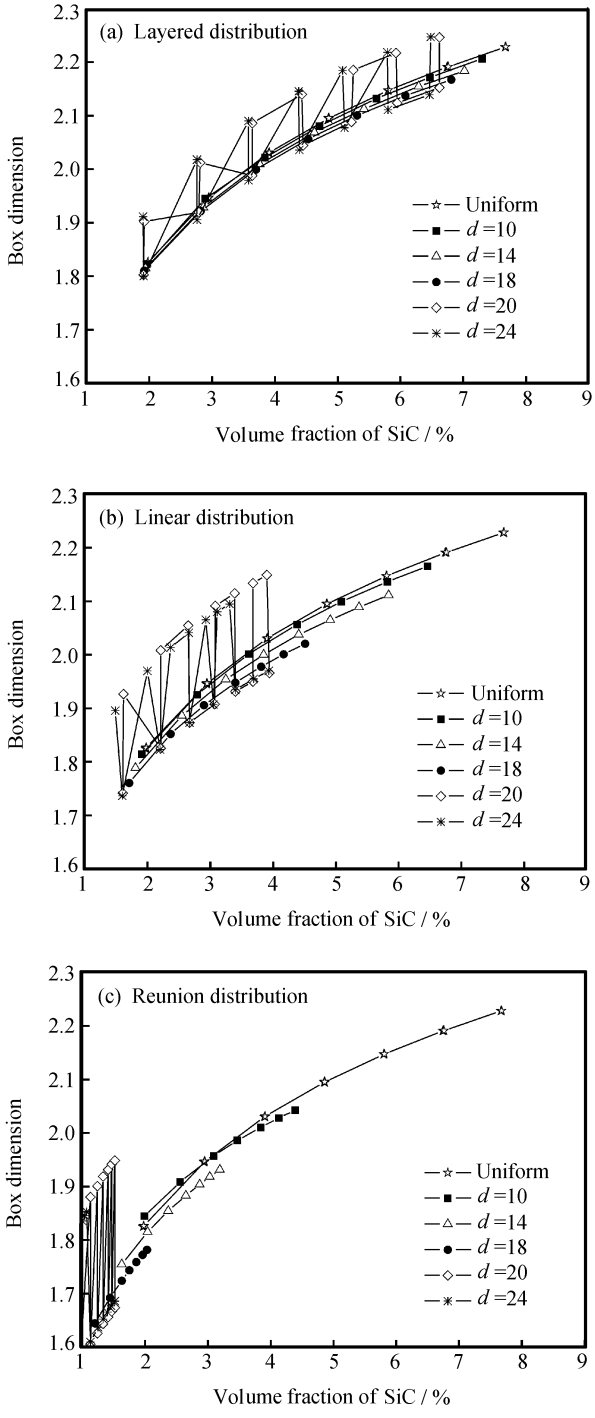


图 5　偏聚分布下纳米 SiC/PTFE 复合材料三维仿真模型的盒维数与 SiC 体积分数、粒子间距的关系($r=2$)

Fig. 5　Relationship of box dimension with volume fraction of SiC and particle span of 3D simulation model of deviation distributed nano SiC/PTFE composite($r=2$)

$d\leqslant 18$(450 nm)时，改变粒子的起始坐标获取的盒维数稳定；纳米粒子的间距固定时，其盒维数随着体积分数的减小或层状、线状、团状分布的改变而减小；纳米粒子的体积分数固定时，其盒维数随着间距的增加或层状、线状、团状分布的改变而减小；纳米粒子的数量固定时，其盒维数随着体积分数的减小或间距的增加或层状、线状、团状分布的改变而减小。对图中数据点进行以下曲线拟合：层间间距 d 为 10、14、18 时的拟合函数为 $D=0.2901\times\ln v+2.9669$、$D=0.2874\times\ln v+2.9497$ 和 $D=0.2826\times\ln v+2.9289$；线间间距 d 为 10、14、18 时的拟合函数为 $D=0.2883\times\ln v+2.9569$、$D=0.2754\times\ln v+2.8956$ 和 $D=0.2683\times\ln v+2.8540$；团间间距 d 为 12、14、18 时的拟合函数为 $D=0.2509\times\ln v+2.828$、$D=0.2628\times\ln v+2.837$ 和 $D=0.2604\times\ln v+2.7959$；$R^2=0.999$。根据纳米 SiC 粒子在 SiC/PTFE 复合材料中的质量分数(3%、5%、7%、9%)所对应的体积分数(2.08%、3.49%、4.92%、6.37%)计算其盒维数 D(见表 3)。相关分析表明，不同偏聚程度的纳米粒子在基体材料中的三维仿真模型的盒维数之间的相关系数均为 1。

$d>18$(450 nm)时，改变粒子的起始坐标后获取的盒维数不稳定，复合材料的微观结构不具有分形特性。

表 3　偏聚分布 SiC/PTFE 复合材料三维模型的盒维数($r=2$)

Table 3　Box dimension of 3D simulation model of deviation distributed nano SiC/PTFE composite with different mass fraction of SiC($r=2$)

Distribution	Span/pixel	3%	5%	7%	9%
Layered	10	1.8434	1.9935	2.0932	2.1695
	14	1.8367	1.9854	2.0841	2.1597
	18	1.8344	1.9807	2.0777	2.1521
Linear	10	1.8404	1.9896	2.0886	2.1644
	14	1.8290	1.9716	2.0661	2.1386
	18	1.8149	1.9538	2.0459	2.1165
Reunion	12	1.8563	1.9862	2.0723	2.1383
	14	1.8195	1.9555	2.0458	2.1149
	18	1.7874	1.9222	2.0116	2.0801

3　实验验证

材料的宏观性能取决于其微观结构，纳米粒子在基体中通常呈均匀分布，粒状复合材料一般达不到偏聚分布。因此，下文仅讨论均匀分布下纳米 SiC 颗粒填充 PTFE 基复合材料试样的力学性能与三维仿真模型的盒维数之间的关系，以验证盒维数定量表征纳米复合材料微观结构的正确性。

试样的制备方法为：将纳米 SiC 颗粒(平均半

径 25 nm)按 1%、3%、5%、7%、9%的质量分数加入 PTFE(平均半径 50 μm)中进行高速搅拌，并采用预冷压烧结成型工艺制成纳米颗粒填充 PTFE 基复合材料[18]。

试样力学性能的测试方法为：在室温条件下，按照 GB/T 1040－1992 测试其拉伸强度和断后伸长率，拉伸速度为 50 mm/min；用 M－2000 型摩擦磨损试验机测试复合材料的摩擦系数、磨损量、洛式硬度、弹性模量和冲击强度，转速为 200 r/min，偶件为 45#钢环，尺寸为 Φ 45 mm×10 mm，表面粗糙度 R_a 为 0.08～0.12 μm。测试结果为 3 次重复实验的平均值(见表 4)。

采用 JSM－6000 型扫描电子显微镜(SEM)观察试样的微观组织结构[18]，由文献[18]中 SEM 图可知，粒子表面能量高，容易团聚，在基体中基本呈随机均匀分布。考虑均匀分布下 SiC 粒子半径 r=1(25 nm)时的三维仿真模型，由图 2 可知，粒子之间不是绝对均匀排列的，具有一定的随机性，也会簇集成群，可近似试样的分布。根据纳米 SiC 粒子在试样中的质量分数(1%、3%、5%、7%、9%)所对应的体积分数(0.69%、2.08%、3.49%、4.92%、6.37%)计算试样的盒维数，将其与试样力学性能的测试结果进行线性回归分析。结果表明，力学性能与盒维数显著相关，$|R|>0.9$(见图 6)，可见，盒维数能够定量地表征纳米复合材料的微观结构，并能够预测其力学性能。

表 4　纳米 SiC/PTFE 复合材料的力学性能

Table 4　Mechanical property of nano SiC/PTFE composite

Mechanical property	Mass fraction of SiC				
	1%	3%	5%	7%	9%
Tensile strength/MPa	19	16	14	13.3	12.8
Elongation at break/%	250	190	132	125	115
Friction coefficient	0.1925	0.1975	0.2035	0.2075	0.2150
Wear loss/mg	43	32.9	14.5	9.3	7.1
Rockwell hardness(HRR)	112	115	119	123	127
Elastic modulus/MPa	285	340	390	460	480
Impact strength/(kJ·m^{-2})	15.04	13.12	12.21	13	11.32

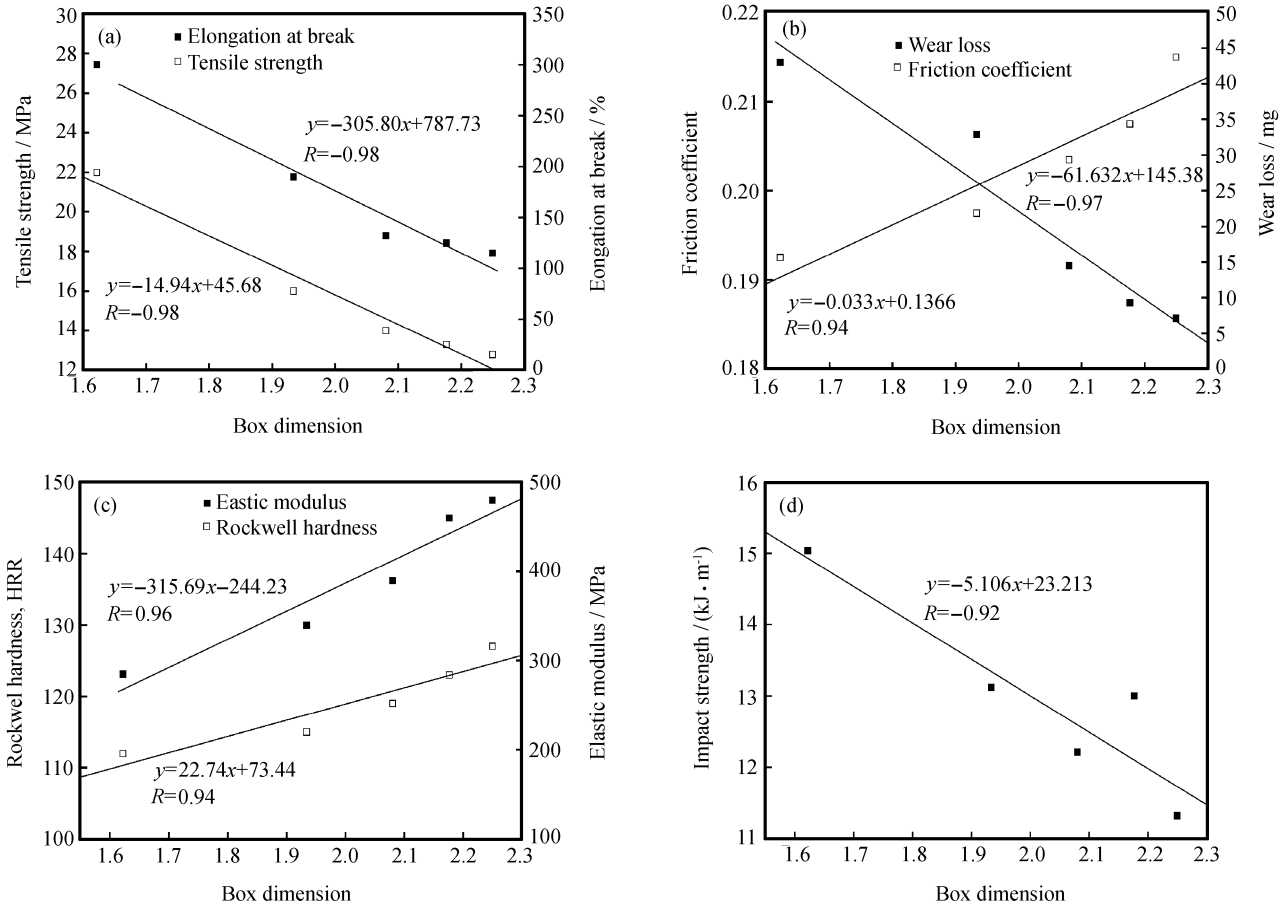


图 6　均匀分布下纳米 SiC/PTFE 复合材料的力学性能与其三维仿真模型盒维数的关系

Fig. 6　Relationship of mechanical property of nano SiC/PTFE composite with box dimension of its 3D simulation model in uniform distribution

4 结　论

（1）纳米 SiC 粒子在 SiC/PTFE（聚四氟乙烯）复合材料中均匀分布时，其三维仿真模型的盒维数随着粒子团聚程度的不断加大或体积分数的不断减小而减小；当粒子团聚至半径超过 100 nm 时，不再具有分形特性。

（2）纳米 SiC 粒子在 SiC/PTFE 复合材料中呈偏聚分布时，其三维仿真模型的盒维数随着粒子间距的不断加大或体积分数的不断减小或层状、线状、团状分布的依次改变而减小，并同比低于均匀分布；当粒子间距超过 450 nm 时，不再具有分形特性。

（3）均匀分布的纳米 SiC/PTFE 复合材料的力学性能与其三维仿真模型的盒维数线性相关，表明盒维数能够定量地表征纳米 SiC/PTFE 复合材料的微观结构，并预测其宏观性能，同时，为基于透射电镜图像定量表征复合材料的实际分布提供理论依据。

参考文献：

[1] Lai S Q, Li T S, Liu X J. The tribological properties of PTFE filled with thermally treated nano-attapulgite [J]. Tribology International, 2006, 39: 541-547.

[2] Xiang D H, Gu C J. A study on the friction and wear behavior of PTFE filled with ultra-fine kaolin particulates [J]. Materials Letters, 2006, 60: 689-692.

[3] Friedrich K, Zhang Z, Schlarb A K. Effect of various fillers on the sliding wear of polymer composites [J]. Composites Science and Technology, 2005, 65: 2329-2343.

[4] Burris D L, Sawyer W G. Improved wear resistance in alumina - PTFE nanocomposites with irregular shaped nanoparticles [J]. Wear, 2006, 260(7/8): 915-918.

[5] Su F H, Zhang Z Z, Liu W M. Friction and wear behavior of hybrid glass/PTFE fabric composite reinforced with surface modified nanometer ZnO [J]. Wear, 2008, 265: 311-318.

[6] 秦湘阁，刘国权. 多晶体晶粒尺度三维组织建模及可视化 [J]. 北京科技大学学报，2001，23(6)：519-522.
Qin Xiangge, Liu Guoquan. 3-D Modeling and visualization of polycrystalline material microstructure at grain scale with time scale [J]. Journal of University of Science and Technology Beijing, 2001, 23(6): 519-522.

[7] 秦湘阁，刘国权. 基于 Monte Carlo Potts 方法的三维大尺度晶粒组织仿真模型及定量表征 [J]. 北京科技大学学报，2004，26(1)：49-52.
Qin Xiangge, Liu Guoquan. Large-scale 3-D model and quantitative characterization of grain microstructure based on Monte Carlo Potts simulation [J]. Journal of University of Science and Technology Beijing, 2004, 26(1): 49-52.

[8] 秦湘阁，刘国权. 颗粒增强复合材料显微组织的计算机仿真 [J]. 佳木斯大学学报：自然科学版，2001，19(1)：1-4.
Qin Xiangge, Liu Guoquan. Computer simulation of microstructures of particle reinforced composites [J]. Journal of Jiamusi University: Natural Science Edition, 2001, 19(1): 1-4.

[9] 潘琼瑶，贺鹏飞，郑百林，等. 颗粒增强复合材料热性能的数值模拟研究 [J]. 太原理工大学学报，2005，36(6)：663-665.
Pan Qiongyao, He Pengfei, Zheng Bailin, et al. Numerical simulation of particle reinforced composites on thermal properties [J]. Journal of Taiyuan University of Technology, 2005, 36(6): 663-665.

[10] 孙永立，于朝阳，史然峰，等. WC、ZrO_2、Cr_2O_3 和 Al_2O_3 陶瓷颗粒/镍合金复合涂层微观组织结构的分形 [J]. 复合材料学报，2005，22(3)：85-91.
Sun Yongli, Yu Zhaoyang, Shi Ranfeng, et al. Fractal characteristic of microstructure of WC, ZrO_2, Cr_2O_3 and Al_2O_3 ceramic particles/nickel alloy composite coatings [J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2005, 22(3): 85-91.

[11] 何　飞，赫晓东，李　垚. 掺杂二氧化硅干凝胶孔结构的分形特性[J]. 复合材料学报，2007，24(1)：81-85.
He Fei, He Xiaodong, Li Yao. Fractal characteristic of the porous structure of the additive silica xerogel [J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2007, 24(1): 81-85.

[12] 聂　鹏，王新鑫，高　霁，等. 纳米复合材料分散相分散均匀性的分形表征 [J]. 北京航空航天大学学报，2009，35(7)：852-855.
Nie Peng, Wang Xinxin, Gao Ji, et al. Fractal characterization of uniformity of discrete phase in nano composites [J]. Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2009, 35(7): 852-855.

[13] Woignier T, Primera J, Hafidi Alaoui A, et al. Mechanical behaviour of nano composite aerogels [J]. Journal of Sol-Gel Science and Technology, 2011, 58(2): 385-393.

[14] Sarkisov P D, Butusov O B, Meshalkin V P, et al. Computer-aided method of analysis of nanocomposite structure on the basis of calculations of isolines of fractal dimensionality [J]. Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 2010, 44(6): 838-843.

[15] Tan L, Wang G, Dong W J, et al. Template-assisted synthesis of polymer-Li composites with fractal patterns [J]. Australian Journal of Chemistry, 2011, 64(2): 190-196.

[16] Amir S, Mohamed N S, Hashim A S A. Simulation model of the fractal patterns in ionic conducting polymer films [J]. Central European Journal of Physics, 2010, 8(1): 150-156.

[17] 胡卫峰，宣益民，李　强. 纳米流体聚集结构的模拟及其分维数分析 [J]. 南京理工大学学报，2002，26(3)：229-234.
Hu Weifeng, Xuan Yimin, Li Qiang. Simulation and fractal analysis of nano particles aggregation [J]. Journal of Nanjing University of Science and Technology, 2002, 26(3): 229-234.

[18] 何春霞，陆德荣，肖声明. 纳米颗粒填充聚四氟乙烯基复合材料的分散性表征 [J]. 上海交通大学学报，2011，45(9)：1411-1415.
He Chunxia, Lu Derong, Xiao Shengming. Dispersion characterization of PTFE composites filled with different nano particles [J]. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2011, 45(9): 1411-1415.