

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИМЕРА,  
МОДИФИЦИРОВАННОГО УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ  
С УЧЕТОМ НАЛИЧИЯ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ<sup>2</sup>**

**Аннотация.** В настоящей работе предложена континуальная перколяционная модель структуры полимера, модифицированного углеродными нанотрубками. В рамках модели, нанотрубки – цилиндры с радиусом  $r$  и разными длинами, случайным образом равномерно распределённые в кубе линейного размера  $L$ . Координаты центра, длина и углы ориентации цилиндра являются случайно сгенерированными числами. Используются периодические граничные условия.

**Ключевые слова:** математическое и компьютерное моделирование, полимер, углеродные нанотрубки, континуальная перколяция, порог перколяции.

**Введение**

В последнее время широкую известность приобретает изготовление материалов с улучшенными свойствами. Особенно перспективны полимерные наноматериалы, модифицированные углеродными нанотрубками (УНТ). Нанокompозитам можно задать необходимые свойства путем введения различных концентраций нанонаполнителей и использования некоторых управляющих факторов. Определение значения критической концентрации наполнителя, при которой возникает какое-либо свойство материала или подвергается изменению, является актуальной задачей на

---

<sup>2</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Пермского края в рамках научного проекта № С-26/793 и гранта РФФИ (№ 17-41-590649).  
© Никитин И.В., Бузмакова М.М., 2019

сегодняшний день, так как существующих исследований в данном направлении недостаточно для построения единой теории структуры и свойств таких наноматериалов.

В настоящей работе авторами предложена континуальная перколяционная модель структуры полимера, модифицированного углеродными нанотрубками. Значение критической концентрации нанонаполнителя, при которой материал значительно меняет свои свойства или приобретает новые, соответствует порогу перколяции модели.

### **Постановка задачи и методы моделирования**

В рамках предложенной континуальной перколяционной модели в качестве нанотрубок используются цилиндры с радиусом  $r$  и разными нормально распределенными длинами (нанотрубки в полимере имеют разную длину). Межфазные слои характеризуются проницаемыми оболочками цилиндров, которые могут пересекаться между собой. Объекты случайным образом равномерно распределены в кубе с линейным размером  $L$ . Положение цилиндра в кубе задается положением его центра, а ориентация задается с помощью углов поворота и наклона. Цилиндры не пересекаются между собой. При моделировании использовались периодические граничные условия.

Цилиндры могут образовывать кластеры – группы рядом находящихся цилиндров при условии, что их проницаемые оболочки пересекаются. С увеличением концентрации цилиндров увеличивается количество и размеры кластеров, малые кластеры объединяются в большие и далее появляется перколяционный кластер. Основной задачей теории перколяции является определение порога перколяции. Порог перколяции соответствует концентрации цилиндров в системе, при которой вероятность возникновения перколяционного кластера равна 50%.

Для предложенной модели был разработан эффективный алгоритм равномерного распределения углеродных нанотрубок в полимере. С помощью критерия согласия Пирсона и критерия Колмогорова-Смирнова [1-3]

была доказана адекватность разработанного алгоритма. Для распределения цилиндров по кластерам использовался модифицированный алгоритм Хошена-Копельмана [4], для нахождения вероятности возникновения перколяции в системе был применен «Волновой алгоритм» [5].

### Результаты и обсуждение

Получены предварительные результаты моделирования с параметрами  $L = 1000$ ,  $r = 1$ ,  $\mu = 100$ ,  $\sigma = 0$ ,  $dist = 0.06, \dots, 0.12$ , где  $\mu$  – математическое ожидание длины,  $\sigma$  – дисперсия длины,  $dist$  – величина межфазного слоя, которые представлены на рис. 1. Для каждой концентрации проводилась  $K = 1000$  испытаний.

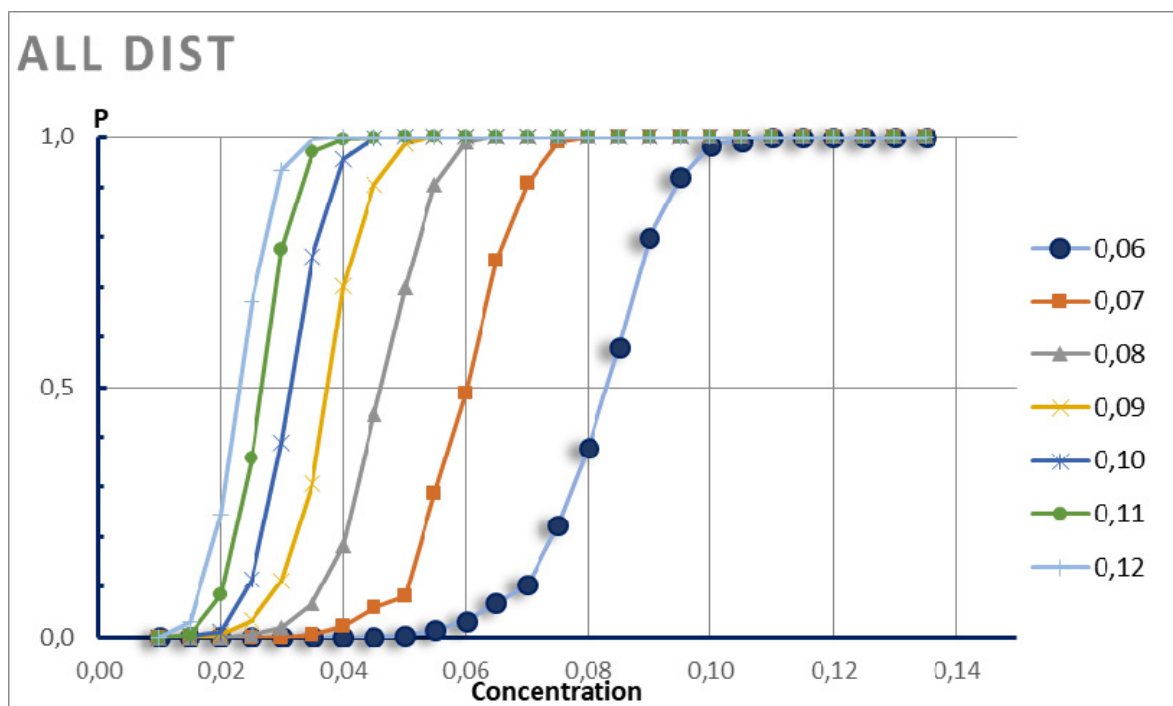


Рис. 1. Вероятность возникновения перколяционного кластера.

Нетрудно заметить, что при увеличении межфазного слоя порог перколяции уменьшается.

Соответствующие значения порога перколяции приведены в таблице 1.

Таблица 2. Пороги перколяции при разных значениях  $dist$ .

$dist$	$P_c$
0.06	$0.0825 \pm 0.0002$
0.07	$0.0598 \pm 0.0001$
0.08	$0.0461 \pm 0.0001$
0.09	$0.0374 \pm 0.0001$
0.10	$0.0314 \pm 0.0001$
0.11	$0.0266 \pm 0.0001$
0.12	$0.0231 \pm 0.0001$

В будущем авторами планируется получение значения порога перколяции для случая бесконечной системы, проведение экспериментов с ненулевой дисперсией длины  $\sigma$  (так как УНТ не имеют фиксированной длины) и выявление зависимости порога перколяции от толщины проницаемого слоя цилиндров с целью попытки прогнозирования критической концентрации нанотрубок в полимере, при которой наноматериал меняет или приобретает новые свойства.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Орлов А.И. Прикладная статистика: учебник. – М.: Экзамен, 2004. – 656 с.
2. Бузмакова М.М. Методика определения оптимального числа интервалов гистограммы при оценке равномерности распределения частиц в неупорядоченной среде с помощью критерия Пирсона // Фундаментальные и прикладные проблемы механики, математики, информатики: сборник докладов всероссийской научно-практической конференции с международным участием. – Пермь, 2015. – С. 178–182.

3. Большев Л.Н., Смирнов Н.В. Таблицы математической статистики. М.: Наука. Главная редакция физико-математическом литературы, 1983.
4. Бузмакова М.М. Компьютерное моделирование континуальной перколяции сфер и эллипсоидов с проницаемыми оболочками: дис. канд. ф.-м. наук. Астраханский гос. университет, Астрахань, 2013.
5. Rubin, F. The Lee path connection algorithm / F. Rubin // IEEE Transactions on Computers. – 1974. – Vol. 23. – P. 907-914.