

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ ПОЛИМЕРА, МОДИФИЦИРОВАННОГО УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Боков К.А., Бузмакова М.М.

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Россия, 614990, Пермь, ул. Букирева, д 15, cyrilevel@rambler.ru, mariya_nazarova@mail.ru

Для исследования структуры полимерных нанокомпозитов успешно используются методы теории перколяции и фракталов [например, 1], так как для подобных материалов характерно перколяционное поведение – пороговое изменение свойств в зависимости от концентрации нанонаполнителя, и наночастицы образуют фрактальные структуры.

В настоящей работе предложена перколяционная модель структуры тонкой пленки полимера, модифицированного углеродными нанотрубками (УНТ). Полимерная матрица представлена квадратной решеткой с линейным размером L , углеродные нанотрубки – k -меры (k -мер – это k подряд занятых узлов решетки). Для диспергирования k -меров на решетке разработан эффективный алгоритм [2]. Для распределения k -меров по кластерам был использован алгоритм Хошена-Копельмана [3], для поиска перколяционного кластера также разработан авторский алгоритм. Получены значения порога перколяции при значениях $k = 1, 2, \dots, 10$. Для $k = 1$ (перколяционная задача узлов), $k = 2$ и 3 значения порога перколяции совпадают или близки к значениям, полученными другими исследователями [4-6], что подтверждает адекватность построенной модели. Авторами предполагается дальнейшее исследование структуры полимера, модифицированного УНТ путем модификации предложенной перколяционной модели с учетом межфазного и межчастичного взаимодействия и рассмотрения трехмерных систем.

Работа поддержана РФФИ (грант № 16-31-00064).

Литература

1. Выровой В. Н., Герсга А. Н. Ансамбль перколяционных кластеров фаз как основа самоподобной структуры композитов // *Вестник ДНАБ*, том 1 (93), 2012. С. 53-57.
2. Боков М. М., Бузмакова М. М. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСПЕРГИРОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПОЛИМЕРЕ // *Математика и междисциплинарные исследования: материалы конференции*, том 2, 2017. С. 14-19.
3. Hoshen, J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // *Physical Review B*, vol. 14, No 8, 1976. P. 3438-3445..
4. Ziff R. M. Test of scaling exponents for percolation-cluster perimeters // *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, 1986. P. 545-548.
5. Cherkasova V. A., Tarasevich Y. Y., Lebovka N. I., Vygornitskii N. V. Percolation of aligned dimers on a square lattice // *Eur. Phys. J. B*. vol. 74, No 2, 2010. P. 205-209.
6. Кармазина Н.Н., Тарасевич Ю.Ю. Ориентированная перколяция линейных 3-меров // *Тезисы XVII конференции МКО-2010*, 2010. URL: <http://www.mce.su/rus/archive/mce17/doc62569/>