

ПЕРКОЛЯЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИМЕРНОГО НАНОКОМПОЗИТА, СОДЕРЖАЩЕГО УГЛЕРОДНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ

Бузмакова М.М.

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Россия,
614068, Пермь, ул. Букирева, д 15, mariya_nazarova@mail.ru

Предложена перколяционная модель структуры полимерного нанокompозита, в котором в качестве полимерной матрицы выступает эпоксидная смола и в качестве углеродного нанонаполнителя – фуллерены. Полимерная матрица представлена сплошной средой, в которую диспергированы фуллерены – сферы. Межфазные области представлены оболочками сфер, которые могут пересекаться и образовывать сферолиты (кластеры). Взаимодействие между фуллеренами характеризуется силами Ван-дер-Ваальса. Порог перколяции соответствует значению критической концентрации фуллеренов в нанокompозите, при которой материал приобретает улучшенные механические, физические и другие свойства.

При моделировании используется алгоритм диспергирования частиц, разработанный автором [1], который обеспечивает качественное равномерное распределение. Поиск перколяционного кластера – кластера частиц, проходящего через всю среду – производится алгоритмом Дейкстры [2]. Две частицы (фуллерены) принадлежат одному кластеру в случае, если пересекаются межфазные области с вероятностью слипания частиц. Вероятность слипания частиц характеризуется Ван-дер-Ваальсовским взаимодействием между фуллеренами, где при расстоянии между фуллеренами, равном связи C-C, вероятность слипания равна 1.

Получено значение порога перколяции при следующих параметрах предложенной модели: отношение размеры среды к размеру частицы равно 140, толщина межфазного слоя равна радиусу частицы – 0.000053 ± 0.000001 мас.ч. Данное значение не противоречит данным других исследователей [3, 4], что подтверждает адекватность предложенной модели.

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

Литература

1. Бузмакова М.М., Русаков С.В. Алгоритмы диспергирования частиц в неупорядоченной среде // *Фундаментальные исследования*. – № 7-2. – 2016. – Стр. 213-217.
2. Dijkstra E. W. A note on two problems in connexion with graphs // *Numerische Mathematik*. — Vol. 1, Iss. 1. — 1959. – P. 269-271.
3. Atovmyan E. G. Badamshina E. R., Estrin Ya. I. Gafurova M. P. Grischuk A. A., Olkhov Yu. A. Polyfunctional Cross-Linking Agents on the Fullerene C60 Base for Polyurethane Nanocomposites // *Abstracts. European Polymer Congress 2005. Moscow*. – P. 56.
4. Игуменова Т. И., Акатов Е. С., Гудков М. А., Попов Г. В. Взаимодействие фуллеренов с полимерами // *Вестник ВГУИТ*. – № 2. – 2012. – Стр. 125-127.