

## Математическое моделирование электропроводности нанокompозита на основе углеродных нанотрубок с учетом эффекта волнистости и индекса дисперсии

*С.А. Корчагин*

*Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, Москва*

**Аннотация:** В работе предложены математические модели, которые позволяют описать электропроводность нанокompозита на основе углеродных нанотрубок с учетом эффекта волнистости и индекса дисперсии. В модели учитывается вклад различных параметров, таких как концентрация нанотрубок, длина, диаметр и ориентация трубок, а также электрические свойства матрицы нанокompозита. С использованием предложенной модели проведены численные эксперименты, позволяющие оценить эффекты волнистости и индекса дисперсии на электропроводность нанокompозита. Представлены сравнения модельных данных с экспериментальными, подтверждающими адекватность и точность модели. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации процесса создания нанокompозитов на основе углеродных нанотрубок, а также для повышения эффективности их применения в различных областях, включая электронику и энергетику.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, программный комплекс, нанокompозиты, электропроводность, углеродные нанотрубки, вычислительный эксперимент.

### Введение

Нанотехнологии являются одной из наиболее динамично развивающихся областей современной науки и техники [1-3]. В частности, углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой один из ключевых наноматериалов, обладающих уникальными свойствами, такими, как высокая электропроводность, механическая прочность и химическая устойчивость. Благодаря этим особенностям УНТ имеют широкий спектр потенциальных применений, включая электронику [4,5], энергетику [6,7], сенсоры [8,9] и биомедицину [10,11].

При создании нанокompозитов на основе УНТ нарушается их регулярная структура, что ведет к появлению эффекта волнистости и изменению индекса дисперсии. Это оказывает существенное влияние на электропроводность таких нанокompозитов, что является важным фактором при разработке новых электронных устройств и материалов [12].

В работе представлено математическое моделирование электропроводности нанокompозита на основе УНТ с учетом эффекта волнистости и индекса дисперсии. Целью работы является разработка математической модели, которая позволяет описывать электропроводность таких нанокompозитов и учитывать их структурные особенности.

### Математическое моделирование

Рассмотрим в качестве примера спонтанно упорядоченный нанокompозит на основе углеродных нанотрубок (УНТ) следующей структуры.

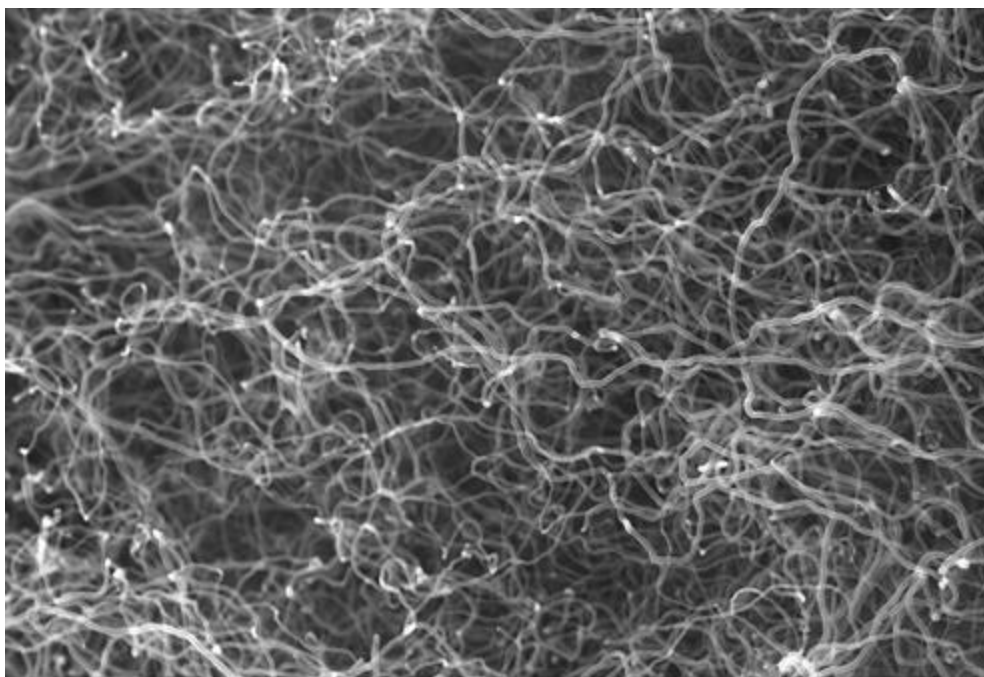


Рис. 1. – Снимок спонтанно упорядоченного нанокompозита на основе карбоновых нанотрубок, полученный с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ)

Математическая модель с учетом эффектов дисперсии и волнистости предлагается на основе концепции среднего расстояния между частицами [13]. Наиболее известной моделью для прогнозирования электропроводности спонтанно упорядоченных накомпозитов на основе УНТ является модель Дэна-Чжэна, которая имеет следующий вид:

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\phi_f \phi_p \sigma_f}{3}, \quad (1)$$

где  $\phi_f$  – объемная доля включений,  $\phi_p$  – доля включений, принадлежащих перколированным проводящим сеткам,  $\sigma_0$  и  $\sigma_f$  обозначают собственные значения электропроводностей полимерной матрицы и включений

Спонтанно упорядоченный нанокомпозит разделен на кубические элементы, каждый из которых содержит один проводящий наполнитель в центре, а общее количество кубических элементов равно общему количеству проводящих наполнителей. Проводящие наполнители могут представлять собой включения различной конфигурации, в нашем примере это могут быть как отдельные углеродные нанотрубки, так и пучок углеродных нанотрубок, в зависимости от состояния дисперсии наполнителя. Объемную долю наполнителя углеродных нанотрубок  $\phi_f$  можно записать следующим образом:

$$\phi_f = \frac{V_{filter}}{V}, \quad (2)$$

где  $V_{filter}$  и  $V$  – суммарный объем наполнителей и объема нанокомпозита соответственно. Для идеальной дисперсии, в которой один кубический элемент содержит одну-единственную углеродную нанотрубку (рисунок 2), порог перколяции  $\phi_p$  может быть представлен, как:

$$\phi_p = \frac{V_{filter}}{V} = \frac{V_{CNT}}{L^3}, \quad (3)$$

где  $L$  — длина кубических элементов,  $V_{CNT}$  — объем одной углеродной нанотрубки.

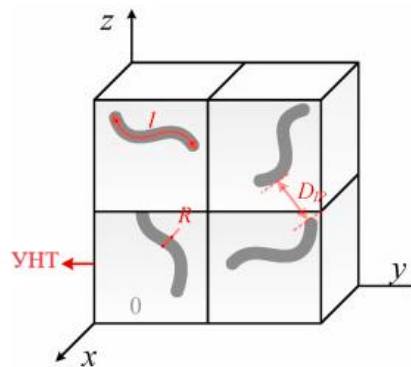


Рис. 2. – Схематическая иллюстрация модели для трехмерных случайно распределенных УНТ в матрицах

Для трехмерного однородного распределения углеродных нанотрубок под углом  $\theta$ , длина кубических элементов  $L$  определяется согласно [14]:

$$L = \cos^2 \theta \cdot (l + D_p), \quad (4)$$

где  $D_p$  — среднее расстояние между частицами, угловые скобки относятся к усреднению ориентации в пространстве Эйлера.

Следовательно, уравнение (2) можно выразить, как:

$$\phi_p = \frac{V_{CNT}}{V} = \frac{\pi R^2 l / 4}{[\cos^2 \theta \cdot (l + D_p)]^3}, \quad (5)$$

где  $R$  — средний диаметр углеродной нанотрубки.

Подобно кристаллической ориентации в полукристаллических полимерах [15], значение  $\cos^2 \theta = \frac{1}{3}$  соответствует трехмерному случайному распределению упорядоченных нанотрубок. Кроме того, поскольку длина упорядоченных нанотрубок  $l$  намного больше, чем  $D_p$ , происходит перескок электронов ( $D_p$  менее 10 нм). Таким образом, порог перколяции  $\phi_p$  для состояния идеальной дисперсии определяется выражением:

$$\phi_p = \frac{\pi R^2 l / 4}{(l/3)^3} = \frac{27 \pi R^2}{4 l^2}. \quad (6)$$

С другой стороны, для полностью агломерирующих в более крупные частицы в нанокомпозитах, порог перколяции  $\phi_p$  может быть аппроксимирован, как:

$$\phi_p = \frac{nV_{CNT}}{L^3}, \quad (7)$$

где  $n$  — количество углеродных нанотрубок в агломерате ( $n > 1$ ,  $n = 1$  соответствует состоянию идеальной дисперсии).

### Результаты работы

В рамках исследования проведено моделирование влияния собственной электропроводности углеродных нанотрубок  $\sigma_f$  на общую электропроводность  $\sigma$ . В работе использовался нанокомпозит со следующими параметрами: длина  $l$ , диаметр  $R$  и коэффициент волнистости  $\lambda$  углеродных нанотрубок составляют 30 мкм, 8 нм и 1,5 нм соответственно. Индекс дисперсии  $\delta$  принимается равным 99%. Пороговое значение перколяции, рассчитанное на основе уравнения (3) составляет примерно 0,005, что не зависит от электропроводности углеродных нанотрубок. Как показано на рисунке 3, электропроводность нанокомпозита с различной объемной долей углеродных нанотрубок линейно увеличивается с увеличением проводимости углеродных нанотрубок. Кроме того, увеличение содержания углеродных нанотрубок приводит к уменьшению межфазной толщины, тем самым увеличивая электропроводность всего нанокомпозита. Наибольшая электропроводность спонтанно упорядоченного нанокомпозита наблюдается при самых высоких значениях  $\sigma_f$  и  $\phi_p$ . Как показано на рисунке 3, электропроводность углеродных нанотрубок положительно влияет на электропроводность всего спонтанно упорядоченного нанокомпозита.

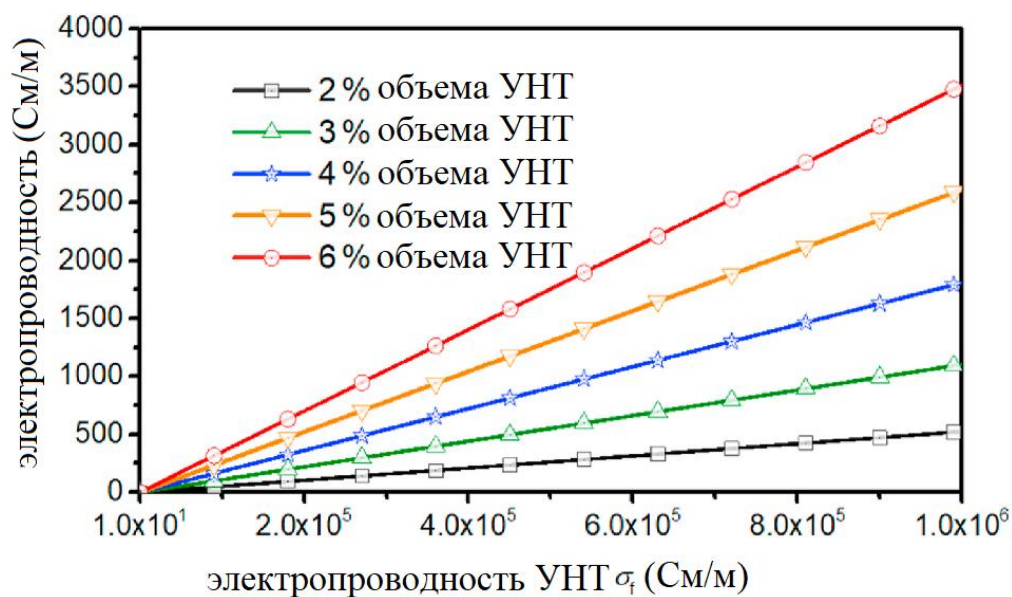


Рис. 3. – Влияние собственной электропроводности УНТ на общую электропроводность нанокомпозита

Влияние длины нанотрубок ( $l$ ) на общую электропроводность спонтанно упорядоченного нанокомпозита рассчитано и показано на рисунке 4. Рассмотрено два случая диаметра углеродных нанотрубок – 8 нм (рисунок 4(а)) и 20 нм (рисунок 4(б)),  $\lambda = 1,5$ ,  $\delta = 99\%$ ,  $\sigma_f = 5000$  См/м. Поскольку длина нанотрубки обычно превышает 1 мкм, рассматриваются длина в диапазоне от 1 до 50 мкм. При одной и той же концентрации углеродных нанотрубок в нанокомпозитах, более длинные нанотрубки обеспечивают более высокие значения электропроводности для обоих случаев, что указывает на то, что электропроводность нанокомпозита может быть увеличена за счет увеличения длины нанотрубок. Длина нанотрубок оказывает существенное влияние на электропроводность нанокомпозитов при  $l < 10$  мкм, а при  $l > 10$  мкм это влияние менее заметно. В спонтанно упорядоченных нанокомпозитах, армированных относительно короткими нанотрубками, электропроводность всего нанокомпозита более чувствительна к длине нанотрубок. В частности, влияние длины более существенно для относительно коротких нанотрубок – менее 5 мкм, как

показано при сравнении (рисунок 4 (а) и 4 (б)). Эти результаты можно объяснить следующим образом: длинные нанотрубки вызывают более проводящие пути в матрице при той же концентрации нанотрубок, что согласуется с исследованиями [16].

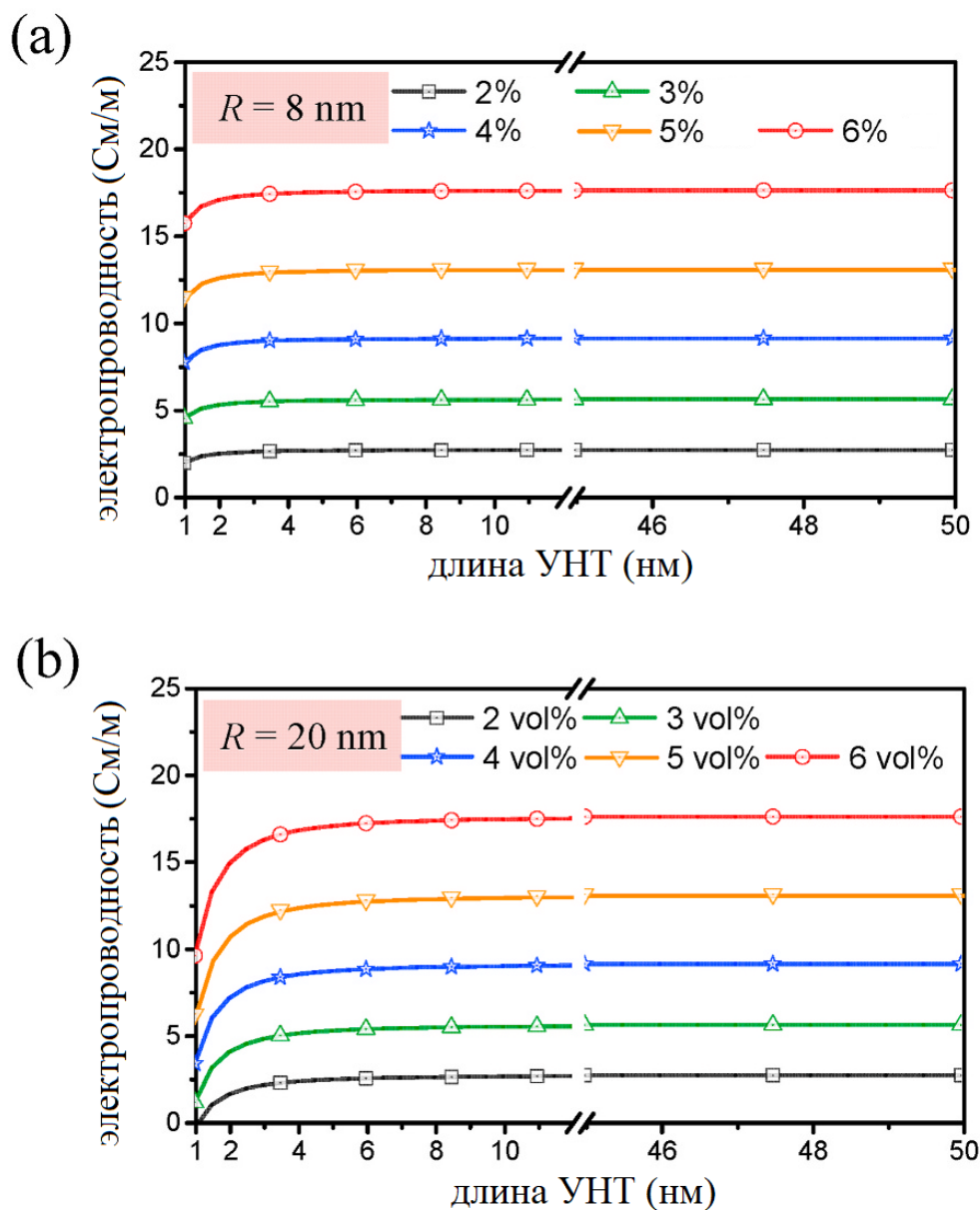


Рис. 4 – Влияние длины УНТ на общую электропроводность нанокompозита ( $\lambda = 1,5$ ,  $\delta = 99\%$ ,  $\sigma_f = 5000$  См/м), диаметра УНТ (а)  $R = 8$  нм и (б)  $R = 20$  нм.

Ряд моделей и экспериментов также показали аналогичное влияние длины нанотрубок на электропроводность нанокомпозитов других морфологий [17]. В спонтанно упорядоченных нанокомпозитах при длине нанотрубок больше определенного значения (например,  $l > 30$  мкм) дальнейшее увеличение длины, не может улучшить электропроводность. Кроме того, сверхдлинные нанотрубки легче запутываются в агломераты в композитах, что может ослабить положительное влияние длины нанотрубок на электропроводность нанокомпозита. Таким образом, выбор подходящих размеров нанотрубок также имеет решающее значение для изготовления материалов с заданной электропроводностью.

Разработанная модель способна прогнозировать порог перколяции и электропроводность спонтанно упорядоченного нанокомпозита. Приведенный выше параметрический анализ демонстрирует влияние размера нанотрубок, проводимости, волнистости и состояния дисперсии на общую электропроводность нанокомпозита. Высокий показатель дисперсии и малая волнистость нанотрубок обуславливают низкий порог перколяции, что является критическим для достижения высокой электропроводности нанокомпозита. Соответственно, приведенные выше результаты и наблюдения подтверждают справедливость модели, представленной для анализа влияния проводимости, размеров, волнистости и дисперсии нанотрубок на электрофизические свойства нанокомпозита.

### **Заключение**

Разработанная модель способна прогнозировать порог перколяции и электропроводность спонтанно упорядоченного нанокомпозита. Приведенный выше параметрический анализ демонстрирует влияние размера нанотрубок, проводимости, волнистости и состояния дисперсии на общую

---



электропроводность нанокompозита. Высокий показатель дисперсии и малая волнистость нанотрубок обуславливают низкий порог перколяции, что является критическим для достижения высокой электропроводности нанокompозита. Соответственно, приведенные выше результаты и наблюдения подтверждают справедливость модели, представленной для анализа влияния проводимости, размеров, волнистости и дисперсии нанотрубок на электрофизические свойства нанокompозита.

Результаты исследования имеют важное практическое значение и могут быть использованы для оптимизации процесса создания нанокompозитных материалов на основе углеродных нанотрубок, а также для повышения эффективности их применения в электронике, энергетике и других отраслях. Кроме того, предложенная математическая модель может послужить основой для дальнейших исследований в области математического моделирования электропроводности наноматериалов с учетом сложных структурных особенностей.

### Литература

1. Пчелинцева Н. В., Чепраков И. В., Картечина Н. В. Нанотехнологии и наноматериалы в современном мире // Наука и образование. – 2022. – Т. 5. – №. 1. – С. 105.
2. Иванов Л. А., Суюй, Л. Д., Бокова, Е. С., Ишков, А. Д. Изобретения в области наноматериалов и нанотехнологий. Часть I // Нанотехнологии в строительстве. – 2022. – Т. 14. – №. 1. – С. 18-26.
3. Kirtane A. R., Verma, M., Karandikar, P., Furin, J., Langer, R. Nanotechnology approaches for global infectious diseases //Nature Nanotechnology. – 2021. – Т. 16. – №. 4. – С. 369-384.
4. Корчагин С. А., Терин Д. В. Метод моделирования диэлектрической проницаемости анизотропного иерархически построенного нанокompозита с

периодической структурой // Письма в Журнал технической физики. – 2021. – Т. 47. – №. 16. – С. 3-5.

5. Борознин С. В. Исследование роли примесных атомов бора в металлизации углеродных нанотрубок // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. – 2023. – Т. 12. – №. 1. – С. 159-173.

6. Zhang P., Su, J., Guo, J., & Hu, S. Influence of carbon nanotube on properties of concrete: A review // Construction and Building Materials. – 2023. – Т. 369. – С. 130388.

7. Zhu M., Lu, P., Wang, X., Chen, Q., Zhu, H., Zhang, Y., Zhang, Z. Ultra- Strong Comprehensive Radiation Effect Tolerance in Carbon Nanotube Electronics // Small. – 2023. – Т. 19. – №. 1. – С. 2204537.

8. Boonyaves K., Ang, M. C. Y., Park, M., Cui, J., Khong, D. T., Singh, G. P., Strano, M. S. Near-Infrared Fluorescent Carbon Nanotube Sensors for the Plant Hormone Family Gibberellins // Nano letters. – 2023. – Т. 23. – №. 3. – С. 916-924.

9. Li Z., Xiao, M., Jin, C., & Zhang, Z. Toward the Commercialization of Carbon Nanotube Field Effect Transistor Biosensors // Biosensors. – 2023. – Т. 13. – №. 3. – С. 326.

10. Корчагин, С. А. Система компьютерного зрения для автоматической классификации нанокompозитов // Информационно-измерительные и управляющие системы. – 2023. – Т. 21, № 5. – С. 16-26.

11. Веденькин Д. А., Шаронов Д. Е. Анализ характеристик управляемой частотно-селективной поверхности в СВЧ диапазоне // Инженерный вестник Дона, 2017, №. 2. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2017/4233](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2017/4233)

12. Благин А. В., Попова, И. Г., Лозовский, С. В., Нефедов, В. В., Нефедова, Н. А. Формирование островковых наноструктур методом сублимационной эпитаксии в технологиях электронной техники //

---

Инженерный вестник Дона, 2023, №. 9. URL:  
ivdon.ru/ru/magazine/archive/n9y2023/8699

13. Jiang W., Zheng D., Xun S., Qin Y., Lu Q., Zhu W., Li H. Polyoxometalate-based ionic liquid supported on graphite carbon induced solvent-free ultra-deep oxidative desulfurization of model fuels // *Fuel*. – 2017. – V. 190. – pp. 1-9.

14. Mohanta D., Patnaik S., Sood S., Das N. Carbon nanotubes: Evaluation of toxicity at biointerfaces // *Journal of Pharmaceutical Analysis*. – 2019. – V. 9. – №. 5. – pp. 293-300.

15. He X. Carbon nanotubes as emerging quantum-light sources // *Nature materials*. – 2018. – V. 17. – №. 8. – pp. 663-670.

16. Yang F., Wang M., Zhang D., Yang J., Zheng M., Li Y. Chirality pure carbon nanotubes: Growth, sorting, and characterization // *Chemical reviews*. – 2020. – V. 120. – №. 5. – pp. 2693-2758.

17. Sang Z., Ke K., Manas-Zloczower I. Effect of carbon nanotube morphology on properties in thermoplastic elastomer composites for strain sensors // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2019. – V. 121. – pp. 207-212.

### References

1. Pchelinceva N. V., Sheprakov I. V., Kartechina N. V. *Nauka i obrazovanie*. 2022. T. 5. №. 1. P. 105.

2. Ivanov L. A., Syuj, L. D., Bokova, E. S., Ishkov, A. D. *Nanotekhnologii v stroitel'stve*. 2022. T. 14. №. 1. pp. 18-26.

3. Kirtane A. R., Verma, M., Karandikar, P., Furin, J., Langer, R. *Nature Nanotechnology*. 2021. T. 16. №. 4. pp. 369-384.

4. Korchagin S. A., Terin D. V. *Pis'ma v Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*. 2021. T. 47. №. 16. pp. 3-5.



5. Boroznin S. V. Izvestiya YUgo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Tekhnika i tekhnologii. 2023. T. 12. №. 1. pp. 159-173.
6. Zhang P., Su, J., Guo, J., Hu, S. Construction and Building Materials. 2023. T. 369. p. 130388.
7. Zhu M., Lu, P., Wang, X., Chen, Q., Zhu, H., Zhang, Y., Zhang, Z. Small. 2023. T. 19. №. 1. P. 2204537.
8. Boonyaves K., Ang, M. C. Y., Park, M., Cui, J., Khong, D. T., Singh, G. P., Strano, M. S. Nano letters. 2023. T. 23. №. 3. pp. 916-924.
9. Li Z., Xiao, M., Jin, C., & Zhang, Z. Biosensors. 2023. T. 13. №. 3. P. 326.
10. Korchagin, S. A. Informacionno-izmeritel'nye i upravlyayushchie sistemy. 2023. T. 21, № 5. pp. 16-26.
11. Veden'kin D. A., SHaronov D. E. Inzhenernyj vestnik Dona. 2017. №. 2. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2017/4233](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2017/4233)
12. Blagin A. V., Popova, I. G., Lozovskij, S. V., Nefedov, V. V., Nefedova, N. A. Inzhenernyj vestnik Dona. 2023. №. 9 URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n9y2023/8699](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n9y2023/8699)
13. Jiang W. Zheng D., Xun S., Qin Y., Lu Q., Zhu W., Li H. Fuel. 2017. V. 190. pp. 1-9.
14. Mohanta D. Patnaik S., Sood S., Das N. Journal of Pharmaceutical Analysis. 2019. V. 9. №. 5. pp. 293-300.
15. He X. Nature materials. 2018. V. 17. №. 8. pp. 663-670.
16. Yang F., Wang M., Zhang D., Yang J., Zheng M., Li Y. Chemical reviews. 2020. V. 120. №. 5. pp. 2693-2758.
17. Sang Z., Ke K., Manas-Zloczower I. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. 2019. V. 121. pp. 207-212.

**Дата поступления: 28.01.2024**

**Дата публикации: 11.03.2024**

---