

ORCID: 0000-0002-4950-394X

А. Р. ГОНДА

аспірант, ННІ ІНФОТЕХ

Черкаський національний університет
імені Богдана Хмельницького, Черкаси, Україна,
andriy.gonda@gmail.com

DOI: 10.31651/2076-5851-2024-81-88

PACS: 05.70.Ln, 02.60.-x, 02.60.Pn

СТОХАСТИЧНА МОДЕЛЬ ПОБУДОВИ ПРОВІДНОГО КЛАСТЕРА СФОРМОВАНОГО ЗА ДОПОМОГОЮ КАРБОНОВИХ НАНОТРУБОК У ДІЕЛЕКТРИЧНІЙ МАТРИЦІ

Розроблено двовимірну стохастичну модель для побудови та дослідження порогу перколяції провідного кластера, що утворено за допомогою карбонових нанотрубок, що випадково розміщені в полімерній діелектричній матриці.

У роботі розроблено двовимірну стохастичну модель, що на основі аналогії із задачею Бюффона дозволяє імітувати випадкове розміщення карбонових нанотрубок у полімерній матриці та виявляти утворення провідних кластерів на планарній сітці. Проведено систематичний аналіз впливу ключових параметрів на ймовірність перколяції: показано, що збільшення кількості нанотрубок прискорює перехід до провідного стану, а подовження трубок знижує критичну концентрацію в наповнювачі, що необхідна для формування безперервного електропровідного шляху. Досліджено також розмірний ефект: із ростом розмірів сітки перехід від непровідного до провідного стану композитного середовища згладжується. Для аналітичного опису перколяційної кривої здійснено перехід від апроксимації за гіперболічним тангенсом до логістичної функції, що спрощує оцінювання порогових параметрів системи.

Отримані результати дають змогу оцінити критичні параметри, необхідні для виникнення електричної провідності в композитних наноматеріалах на основі карбонових нанотрубок в діелектричних матрицях.

Ключові слова: композитна матриця, стохастична модель, задача Бюффона, електропровідність, перколяція, перколяційний кластер, карбонові нанотрубки.

1. Вступ

Електропровідні полімерні композити, наповнені карбовими нанотрубками, є перспективними матеріалами, завдяки поєднанню унікальних механічних, теплових та електричних властивостей. Завдяки наявності в подібних матеріалах альтернативних електричних шляхів сформованих по границях перетину нанотрубок матеріали на основі композитних матриць мають перспективи в розробці електронагрівальних елементів, гнучкої електроніки, сенсорних пристроїв та систем накопичення енергії [1]. Ключове явище, що зумовлює появу макроскопічної провідності в таких матеріалах —

перколяція: при перевищенні критичної концентрації нанотрубок формується суцільна мережа, яка дозволяє проводити електричний струм від одного електрода до іншого. Точне визначення перколяційного порогу є важливим для раціонального проектування композитів із заданими електричними характеристиками.

У цій роботі запропоновано двовимірну стохастичну модель, натхненну класичною задачею Бюффона [2]. Карбонові нанотрубки у вигляді голок фіксованої довжини випадково розміщуються та орієнтуються на планарній сітці, що моделює полімерну діелектричну матрицю з електродами зліва та справа. Кожна «голка» позначає найближчі вузли сітки, утворюючи бінарну карту заповнення. Далі за допомогою алгоритму пошуку кластерів визначається наявність провідної структури, що сполучає електроди. На основі моделі проведено дослідження впливу кількості карбонових нанотрубок, їх довжини, розміру сітки та густини заповнення на ймовірність перколяції.

2. Постановка задачі

Для дослідження ймовірності утворення провідного кластера використано стохастичний метод, що подібний до задачі Бюффона [3], але для двовимірного випадку. Для дослідження вибрано переріз провідної пластини в якій на електроди (зліва та справа) подана різниця потенціалів. Простір між електродами розділений на рівномірну за відстанню просторову сітку, на якій можуть знаходитись карбонові нанотрубки в довільній кутовій орієнтації. Для цього вибирають фіксовану кількість n карбонових «голок» з фіксованою довжиною L . Для дослідження, що голка дійсно потрапляє на конкретні вузли сітки її кидають зверху та визначають до яких вузлів сітки голка знаходиться найближче. Відповідні вузли сіток маркуються числовим позначенням (1 – голка накладається, 0 – перетину нема). Спочатку вся сітка ініціалізована нулями. Після розкидання голок з довільною орієнтацією на сітці відбувається спроба побудови перколяційного кластеру, який проводить струм в напрямку зліва направо.

Приклад побудованого кластеру показано на Рис. 1.

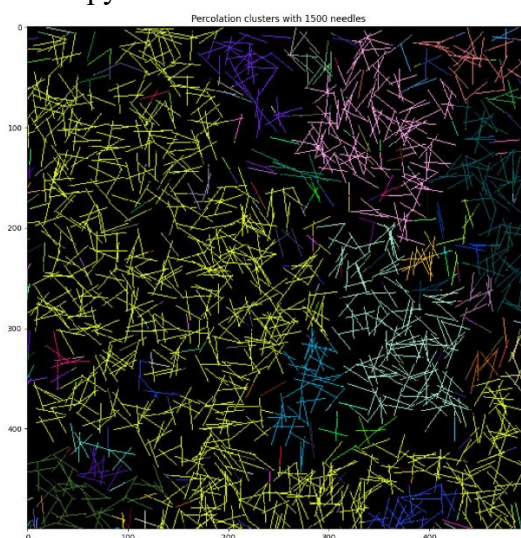


Рис. 1. Побудова провідних кластерів на основі провідних голок
Fig 1. Conductive clusters composition based on conductive needles

3. Дослідження залежності ймовірності перколяції від кількості та довжини карбонових нанотрубок

Для перевірки поведінки модельної системи за наявності різної кількості голок та змінної довжини нанорозмірних трубок (голок) побудовано залежність ймовірності перколяції від кількості голок, що має показати, яка концентрація голок необхідна для того, щоб забезпечити провідність в системі. Для цього в сітці фіксованих розмірів, а саме 500x500, кількість голок поступового змінювали та перевіряли ймовірність утворення провідного кластеру в результаті 100 запусків. Кількість успішних запусків з утворенням провідного кластеру до загальної кількості запусків показує ймовірність перколяції за заданого коефіцієнта заповнення. Отримана залежність ймовірності перколяції провідного кластеру від кількості голок показана на Рис. 2.

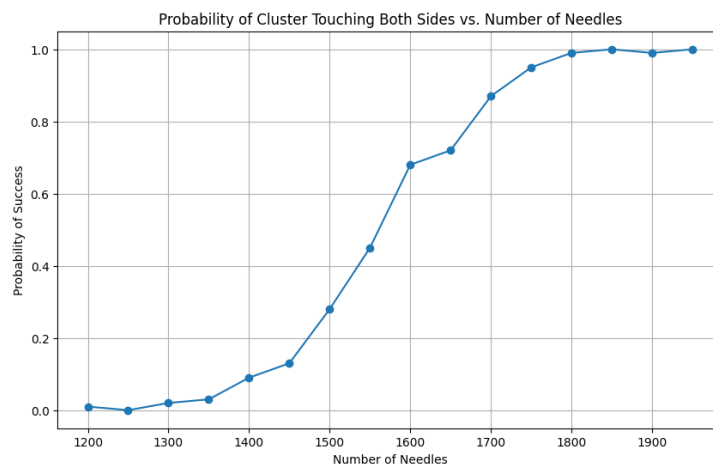


Рис. 2. Ймовірність утворення провідного кластеру від кількості голок.

Fig. 2. Conductive cluster creation probability dependent on needles count.

Також, було досліджено залежність ймовірності перколяції від довжини голок. Алгоритм отримання залежності ймовірності перколяції є подібним до вищеописаного, єдина відмінність, що фіксація ймовірності перколяції здійснювалась за фіксованої кількості провідних голок за їх змінної довжини в одиницях просторової сітки. Отримана залежність ймовірності перколяції від довжини голок показано на Рис. 3.

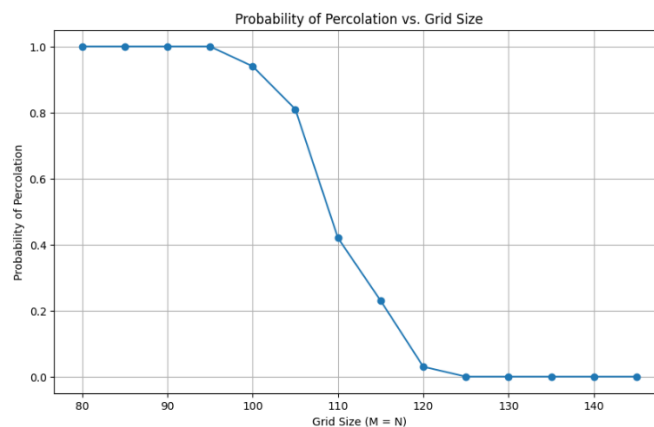


Рис 3. Ймовірність перколяції в залежності від довжини провідних нанотрубок.

Fig 3. Conductive cluster percolation probability depends on the length of conductive nanotubes.

Додатково досліджено ймовірність перколяції провідного кластеру від розміру сітки модельної системи. Залежність розмірного ефекту модельної системи показано на Рис. 4. Для отримання залежності розмір сітки було взято квадратним, тобто, $N=M$. Кількість нанотрубок та їх довжина в ході дослідження залежності були фіксовані.

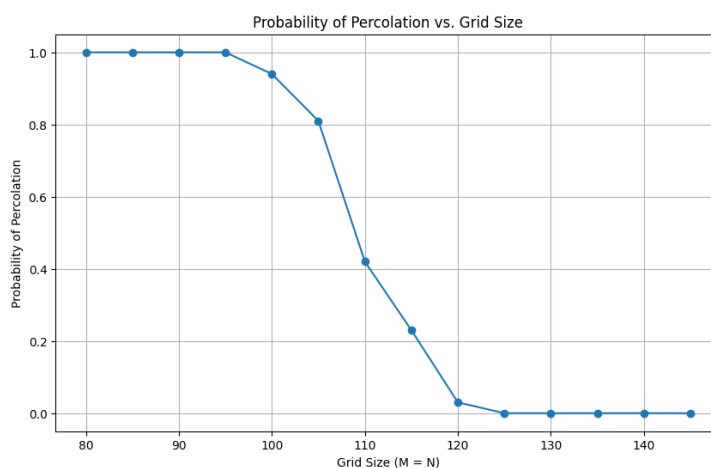


Рис 4. Залежність перколяції провідного кластеру від розміру модельної сітки.

Fig 4. Conductive cluster percolation probability depends on the model grid size.

Досліджено також залежність ймовірності перколяції провідного кластеру від густини перколяції. Густина перколяції була визначена як відношення кількості голок n до загальної площі сітки ($N \times M$). Залежність ймовірності перколяції провідного кластеру від густини перколяції показана на Рис 5.

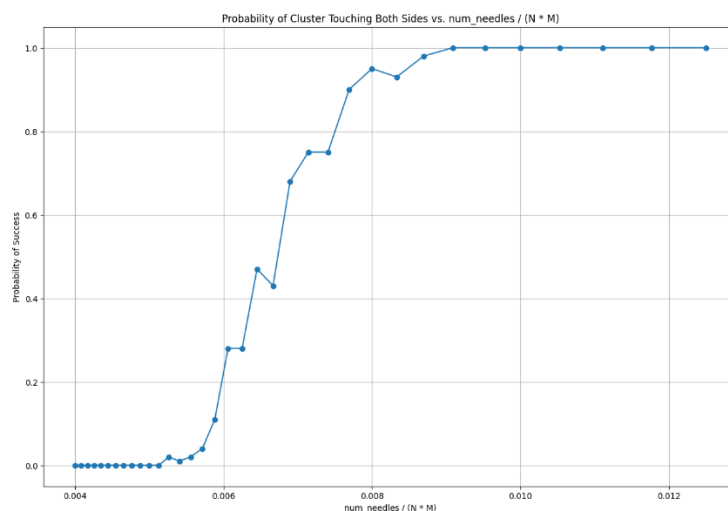


Рис 5. Залежність імовірності перколяції провідного кластеру від густини перколяції.

Fig 5. Conductive cluster percolation probability is based on percolation density.

Отримана залежність імовірності перколяції провідного кластеру від густини перколяції добре апроксимується за допомогою тангенса гіперболічного. Наближення з використанням цього припущення показано на Рис. 6.

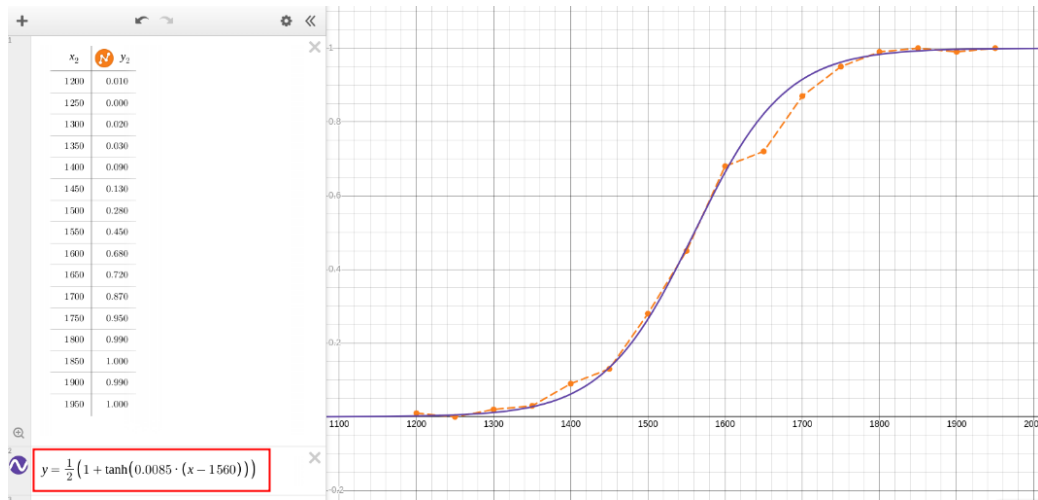


Рис 6. Наближення залежності імовірності перколяції провідного кластеру від густини перколяції за допомогою тангенса гіперболічного.

Fig 6. Conductive cluster percolation dependence by density of percolation approximation based on tanh.

Враховуючи результат наближення, можна показати, що залежність ймовірності перколяції кластеру P від густини перколяції $\rho = \frac{n}{N \times M}$ добре апроксимується наступною функцією:

$$P(\rho) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(k(\rho - \rho_p)) \right), \quad (1)$$

де ρ_p – поріг перколяції.

Враховуючи властивості тангенса гіперболічного, можна показати, що

$$P(\rho) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(k(\rho - \rho_p)) \right) = \frac{1}{1 + e^{-2k(\rho - \rho_p)}} \quad (2)$$

Введемо наступні заміни: $x = \rho - \rho_p$, та $K = 2k$ тоді вираз набуде вигляду:

$$P(x) = \frac{1}{1 + e^{-Kx}} \quad (3)$$

Взявши похідну по x , отримаємо:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{d}{dx} (1 + e^{-Kx})^{-1} = \frac{K e^{-Kx}}{(1 + e^{-Kx})^2} \quad (4)$$

Вираз e^{-Kx} можна переписати через саму функцію $P(x)$, звідси:

$$\frac{dP}{dx} = KP(x) \cdot (1 - P(x)) \quad (5)$$

Подібна структура рівняння є аналогічною до логістичного рівняння [5] та вказує на те, що залежність ймовірності перколяції від густини перколяції може бути описана логістичною кривою.

4. Висновки

Розроблено двовимірну стохастичну модель яка на основі аналогії з задачею Бюффона дозволяє ефективно моделювати розміщення карбонових нанотрубок (голок) у полімерній матриці та визначати утворення провідних кластерів на просторовій сітці.

Проведено систематичний аналіз залежності ймовірності перколяції від ключових чинників:

- **кількості нанотрубок:** збільшення числа нанотрубок призводить до швидшого переходу до провідного стану;
- **довжини нанотрубок:** довші трубки зменшують критичну концентрацію для перколяції;
- **розміру сітки:** виявлено ефект розмірного масштабування, який впливає на плавність переходу.

Здійснено перехід від вигляду апроксимаційної функції у формі тангенса гіперболічного до логістичної кривої. Було показано, що функція виду:

$$P(\rho) = \frac{1}{1 + e^{-K(\rho - \rho_p)}}$$

є математично еквівалентною гіперболічному тангенсу при $K = 2k$, що пов'язує отриману залежність з рівнянням логістичної кривої.

Подяки.

Автор висловлює подяку професору Гусаку А.М. за надання консультацій під час розробки моделі. Робота виконувалась за підтримки МОН України в рамках виконання НТР, № держреєстрації 0123U104477.

Список використаної літератури:

1. Behbahani A. F., Foroozani, et al. Electrical percolation behavior of carbon fiber and carbon nanotube polymer composite foams: Experimental and computational investigations // *Journal of Applied Polymer Science*. – 2015. – Vol. 132, No. 42. Режим доступу: <http://dx.doi.org/10.1002/app.42685>
2. Yat, C. H. Investigation On Buffon-Laplace Needle Problem / C. H. Yat, F. P. Kiu, L. S. Him, L. K. C. Justin, T. S Lam, Man, C. Cheung // . – 2021. Режим доступу: https://hlma.hanglung.com/getattachment/f46f7ae5-2afb-4df5-996b-5eedd47996a3/17-hm_wyk.pdf
3. Arnou B. J. On Laplace's extension of the Buffon needle problem / B. J. Arnou // *The College Mathematics Journal*. – 1994. – Vol. 25, No. 1. – P. 40–43. Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/07468342.1994.11973580>
4. Law R. Dieckmann U. Population growth in space and time: spatial logistic equations / R. Law, D. J. Murrell // *Ecology*. – 2003. – Vol. 84, No. 1. – P. 252–262. Режим доступу: [https://doi.org/10.1890/0012-9658\(2003\)084\[0252:PGISAT\]2.0.CO;2](https://doi.org/10.1890/0012-9658(2003)084[0252:PGISAT]2.0.CO;2)
5. Groff J. R. Exploring dynamical systems and chaos using the logistic map model of population change / J. R. Groff // *American Journal of Physics*. – 2013. – Vol. 81, No. 10. – P. 725–732. Режим доступу: <https://doi.org/10.1119/1.4813114>

References:

1. Behbahani, A. F., Motlagh, G. H., Ziaee, M., & Nikravan, G. (2015). Electrical percolation behavior of carbon fiber and carbon nanotube polymer composite foams: Experimental and

- computational investigations. *Journal of Applied Polymer Science*, 132(42). Retrieved from <http://dx.doi.org/10.1002/app.42685>
2. Yat, C. H., Kiu, F. P., Him, L. S., Justin, L. K. C., Lam, T. S., & Man, C. W. (2021). Investigation On Buffon-Laplace Needle Problem. Retrieved from https://hlma.hanglung.com/getattachment/f46f7ae5-2afb-4df5-996b-5eedd47996a3/17-hm_wyk.pdf
 3. Arnow, B. J. (1994). On Laplace's extension of the Buffon needle problem. *The College Mathematics Journal*, 25(1), 40-43. Retrieved from <https://doi.org/10.1080/07468342.1994.11973580>
 4. Law, R., Murrell, D. J., & Dieckmann, U. (2003). Population growth in space and time: spatial logistic equations. *Ecology*, 84(1), 252-262. Retrieved from [https://doi.org/10.1890/0012-9658\(2003\)084\[0252:PGISAT\]2.0.CO;2](https://doi.org/10.1890/0012-9658(2003)084[0252:PGISAT]2.0.CO;2)
 5. Groff, J. R. (2013). Exploring dynamical systems and chaos using the logistic map model of population change. *American Journal of Physics*, 81(10), 725-732. Retrieved from <https://doi.org/10.1119/1.4813114>

A. R. HONDA

PhD-student,

Educational-Scientific Institute of Informational and Educational Technologies

The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine

andriy.gonda@gmail.com

STOCHASTIC MODEL FOR CONSTRUCTING A CONDUCTIVE CLUSTER FORMED BY CARBON NANOTUBES ON A COMPOSITE GRID

DOI: 10.31651/2076-5851-2024-81-88

PACS: 05.70.Ln, 02.60.-x, 02.60.Pn

A two-dimensional stochastic model has been developed for constructing and investigating the percolation threshold of a conductive cluster. The cluster is formed by carbon nanotubes embedded in a polymer dielectric matrix.

In this work, a two-dimensional stochastic model was developed, which, based on an analogy with Buffon's needle problem, simulates the random distribution of carbon nanotubes in the polymer matrix and detects the formation of conductive clusters on a planar grid. A systematic analysis of the influence of key parameters on the probability of percolation was carried out: it was shown that increasing the number of nanotubes accelerates the transition to a conductive state, while elongation of the nanotubes reduces the critical filler concentration required to form a continuous path. The size effect was also investigated: as the grid size increases, the transition from non-conductive to conductive state becomes smoother. For the analytical description of the percolation curve, the approximation using the hyperbolic tangent was replaced with a logistic function, which simplifies the estimation of the system's threshold parameters.

The obtained results make it possible to evaluate the critical parameters necessary for the emergence of electrical conductivity in composite nanomaterials based on carbon nanotubes.

Keywords: composite matrix, stochastic model, Buffon needle problem, electroconductivity, percolation, percolation cluster, carbon nanotubes.

Одержано редакцією 28.10.2024

Прийнято до друку 02.12.2024