

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2026.8.11>

УДК: 537.311+678.07

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ С УГЛЕРОДНЫМ НАПОЛНИТЕЛЕМ

С.В. Белим

Омский государственный технический университет,
644050, Омск, пр. Мира, 11

Статья поступила в редакцию 8 июля 2026 г.

Аннотация. Проводящие полимерные композиты с углеродным наполнителем активно используются в электронных устройствах для экранировки различных узлов. Технический углерод является одним из самых дешевых материалов, используемых в качестве наполнителя и обеспечивающих электрическую проводимость. В статье исследуется электрическая проводимость полимерных композитных материалов с наполнителем из технического углерода (сажи) методом компьютерного моделирования. Предложен новый подход к формированию агломератов частиц углерода на основе метода Монте-Карло. Агломераты обладают электрической проводимостью в силу своего состава и структуры. При моделировании учитывается два механизма проводимости между агломератами. Электрический ток проходит при непосредственном контакте между частицами агломератов. Также возможен туннельный эффект для электронов между соседними агломератами при малом расстоянии между ними. При моделировании вводится максимальное расстояние между агломератами, обеспечивающее электрическую проводимость. На основе поиска проводящих контактов между агломератами вводится граф, соответствующий электрической сети, образуемой агломератами внутри образца композитного

материала. Поиск проводящих путей осуществляется с помощью алгоритма кластеризации графа, выявляющего подмножество связанных агломератов. Исследованы системы с различной концентрацией частиц технического углерода. В рамках компьютерного эксперимента получена зависимость вероятности возникновения электропроводящих путей от концентрации частиц технического углерода. Показано, что в системе происходит электрическая перколяция, переводящая композит из диэлектрического состояния в проводящее. Перколяционный переход происходит в интервале значения объемной концентрации от 5 % до 15 %. При объемных концентрациях частиц углерода выше 15 % проводящие пути образуются с вероятностью равной единице и композитный материал становится проводником. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными. Отличие предложенной модели от разработанных ранее состоит в учете структуры, формы и разброса значений размеров агломератов. Такое уточнение модели позволяет повысить согласие результатов моделирования с экспериментальными данными. Поиск проводящих путей на основе алгоритма кластеризации дает не только длину пути, но и позволяет учитывать изменение толщины проводящей цепочки агломератов.

Ключевые слова: проводимость композитов, компьютерное моделирование, метод Монте-Карло.

Финансирование: Исследования поддержаны грантом РНФ № 26-29-20003 и соглашением №23 с Омской областью от 08.07.2026

Автор для переписки: Белим Сергей Викторович e-mail: sbelim@mail.ru

Введение

Проводящие полимерные композиты на основе углеродных наполнителей широко используются при решении задач электрической экранировки и реализации переносных электронных устройств. В этих искусственных материалах в качестве матрицы используются различные полимерные материалы: полиэтилен, полипропилен, полиуретан, полиимид и полиэфирэфиркетон.

Все эти материалы являются электрическими изоляторами [1,2,3]. Модификация полимерных материалов физическими и химическими методами преобразует их в электрические проводники. Проводящие полимерные материалы делятся на два типа по типу наполнения: собственные и наполненные. Проводящие материалы собственного типа (полиацетилен, полианилин и полипирен) имеют относительно низкую электропроводность (<100 См/см) [4,5,6]. Производство таких материалов является достаточно дорогим и сложным. Наполненный тип проводящих полимеров реализуется добавлением проводящих частиц в полимерную матрицу. Полимеры наполненного типа обладают хорошей проводимостью [6,7]. Эти материалы обладают низкой стоимостью производства, малой плотностью и хорошей электропроводностью. Проводящие полимерные композиты на основе частиц технического углерода имеют плотность 1,8-2,1 г/см³ при электропроводности 0,1-10 См/см [8]. Больших значений электропроводности (10^4 См/см) в композитах на основе наночастиц [9,10].

Электрическая проводимость в полимерных композитах на основе углеродных частиц реализуется в результате перколяционного фазового перехода. Большинство полимерных материалов имеют удельное сопротивление от 10^{12} до 10^{17} Ом·см [11], Добавление углеродных частиц повышает проводимость композитного материала по нелинейному закону. Малые концентрации частиц слабо влияют на проводимость. Проводимость растет медленно для этого случая, Существует концентрация частиц, которая резко повышает проводимость, преобразуя изолятор в проводник. Дальнейшее повышение концентрации частиц снова приводит к медленному росту проводимости [12]. Эта зависимость известна как электрическая перколяция, а критическая концентрация частиц называется порогом перколяции [13]. Порог перколяции зависит от полимера и наполнителя [14,15,16,17]. Критическая доля наполнителя определяет порог перколяции. Электрическая проводимость в полимерных композитах основана на двух процессах: контакт углеродных частиц и туннелирование. Углеродные частицы образуют проводящую сеть внутри композита при их концентрации выше порога перколяции [7,8].

Компьютерное моделирование проводящих композитных материалов позволяет, не только теоретически получить значение порога перколяции, но исследовать закономерности поведения системы в широком диапазоне параметров, недоступном в реальном эксперименте. Различные модели были предложены для моделирования проводящей перколяции в полимерных композитах. Сигмоидальные модели (S-модели) продемонстрировали свою применимость для вычисления порога перколяции в проводящих полимерах [18]. Микромеханическая модель для композитных полимерных материалов на основе нанотрубок выявила зависимость проводимости от размера углеродных частиц [19]. Моделирование методом молекулярной динамики для нанокомпозитов с шариковыми и стержневыми наполнителями [20] продемонстрировало синергетический эффект проводимости. Моделирование композитов на основе метода конечных объемов и метода дискретных элементов [21] предсказывает количество углеродных частиц, необходимых для достижения проводимости. Все эти модели имеют высокую вычислительную сложность и не учитывают стохастичность распределения частиц.

Одним из перспективных материалов для наполнителей является технический углерод. Этот материал характеризуется низкой стоимостью и стабильными характеристиками. Свойства полимерных композитов на основе технического углерода зависят от множества факторов [22]. Моделирование таких материалов с микроскопической точки зрения является достаточно сложным. Метод Монте-Карло дает наиболее адекватные результаты.

Частицы технического углерода имеют сферическую или близкую к сферической форму с диаметром от 10 до сотен нанометров. Физические и химические свойства частиц технического углерода приводит к тому, что они не распадаются в полимерах на отдельные частицы, а существуют в виде многочастичных агрегатов. Низкоструктурированные агрегаты могут содержать от 30 до 100 частиц, а высокоструктурированные агрегаты содержат от 100 до 300 частиц [23,24]. Агрегаты не имеют регулярной формы. Однако модели композитных материалов базируются на сферических агрегатах, включающих

в себя как частицы технического углерода, так и часть полимерной матрицы. Кроме этого, модели используют разный подход к расчету контактной проводимости между сферическими агрегатами.

Модель сферических наполнителей с туннельной проводимостью на основе формулы Ландауэра-Бюттикера [25] позволила построить сеть проводимости внутри полимерной матрицы. Расчет сопротивления на основе правил Кирхгофа позволил получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными. Эта модель легко применяется к любой комбинации полимера и наполнителя и может использоваться в качестве предсказательного инструмента при проектировании композитов с заданными электрическими свойствами.

Модель заполнения [26] определяет вероятность связности 100 случайно распределенных агрегатов. Расчеты в этой модели показывают, что с вероятностью более 50 % электрическая перколяция происходит для массовой доли частиц углерода 6.2 %.

Модель проводимости полимеров, наполненных частицами углерода, на основе алгоритма эквивалентного сопротивления для крупномасштабных сетей [27] продемонстрировала возможность расчета электрических свойств таких композитов. Агрегаты частиц в этой модели также считались сферами постоянного радиуса. Исследование влияния распределения размеров частиц на электропроводность композитов [28] показало, что увеличение их среднего диаметра снижает порог перколяции. При этом функция распределения размеров частиц не влияет на порог перколяции. Исследование других факторов, влияющих на порог перколяции [29] продемонстрировало, что в модели Монте-Карло наиболее выгодной формой полимера является куб. Исследование процесса туннелирования электронов между частицами [30] показало, что при уменьшении расстояния на 1 нм высота барьера снижается на 1 эВ, а проводимость повышается на порядок.

Целью данной статьи является исследование возникновения проводящих электрических путей в проводящих полимерных композитах при низких

концентрациях наполнителя из технического углерода. Основной задачей является определение вероятности возникновения электрической проводимости при концентрациях ниже порога электрической перколяции. Эта проблема важна для описания выяснения причин разброса в значениях порога перколяции, наблюдаемого в экспериментальных исследованиях.

1. Модель формирования конфигурации композита

Моделирование системы начинается с построения отдельных агломератов частиц сажи. Фотографии электронного сканирующего микроскопа показывают, что полимер с добавлением частиц сажи имеет пористую структуру. Форма пор близка к сферической. В порах располагаются агломераты сажи, которые также имеют форму близкую к сферической. Пример изображения агломерата приведен на рисунке 1.

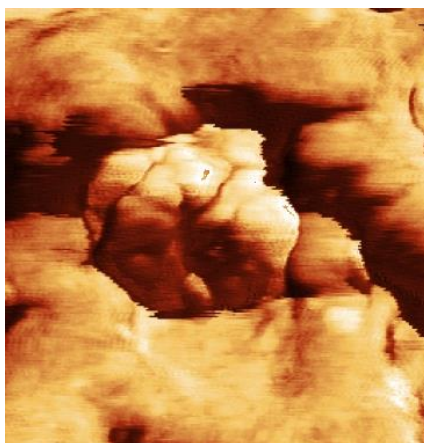


Рис. 1. Изображение агломерата, полученное с помощью сканирующей электронной микроскопии.

Процесс изготовления полимерных композитов включает начальный этап перемешивания частиц полимера и сажи. На этом этапе частицы сажи распределяются по объему случайно. Дальнейшая термическая обработка приводит к формированию пор в полимере и образования агломератов в них. На этом принципе построим алгоритм формирования отдельного агломерата с применением метода Монте-Карло.

Пусть агломерат содержит N_a частиц сажи. Используем предположение, что все частицы имеют одинаковую форму шара и одинаковый размер.

Это предположение основано на том, что современные производители обеспечивают небольшой разброс в размере частиц. Шарообразная форма принята для удобства моделирования. Учитывая малые размеры частиц и их большое количество в агломерате, это предположение не оказывает большое влияние на результат симулирования. Радиус отдельной частицы равен r_c .

На начальном этапе частицы сажи случайным образом распределяются в пространстве внутри сферы радиусом R_0 . Расчеты проводились для $R_0 = 2N_a r_c$. В худшем случае все частицы выстроятся в один ряд вдоль радиуса этой сферы и поместятся в ней. Одна из частиц помещается в центр будущего агломерата и служит его зерном. Для начального распределения остальных частиц используется сферическая система координат. Для каждой частицы случайным образом определяется расстояние до центра и два угла. Для выработки случайных величин используется линейный конгруэнтный генератор псевдослучайных последовательностей. Если в результате начального распределения получены пересекающиеся частицы, то одна из частиц переносится в свободную точку пространства случайным образом.

После формирования начальной конфигурации происходит моделирование сжатия множества частиц сажи к центру агломерации. Данный процесс моделируется с помощью метода Монте-Карло. Один шаг Монте-Карло состоит в том, что предпринимается попытка сдвинуть каждую частицу сажи на случайный вектор в направлении центра агломерата. Величина вектора сдвига не превышает $0.1r_c$. Если сдвиг невозможен из-за присутствия другой частицы, то выполняется попытка сдвинуть эту же частицу на вектор, перпендикулярный к направлению на центр агломерата. Таким образом, каждая частица совершает случайные блуждания с выделенным направлением на центр агломерата. Большинство частиц приходит в точку устойчивого равновесия за счет контакта с другими частицами. Выполняется N_M шагов Монте-Карло. После чего агломерат сформирован.

Отдельно необходимо остановиться на моделировании контакта двух частиц. В точке соединения двух частиц происходит образование “шейки” и рост

поверхности, обеспечивающей электропроводность [30]. Для моделирования этого явления использовалось сближение центров частиц на расстояние равное $1.8r_c$. При этом образуется шейка в виде окружности радиусом $r_s = \sqrt{0.19}r_c \approx 0.44r_c$ (Рисунок 2).

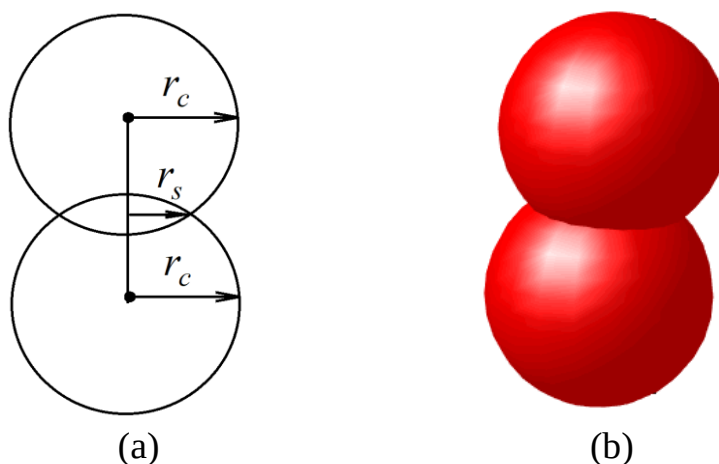


Рис. 2. Моделирование контакта двух частиц:
а) схематическое изображение в разрезе, б) результат моделирования.

На рисунке 3 представлены примеры сформированных агломератов из 100 частиц. Число шагов Монте-Карло равно 10^6 .

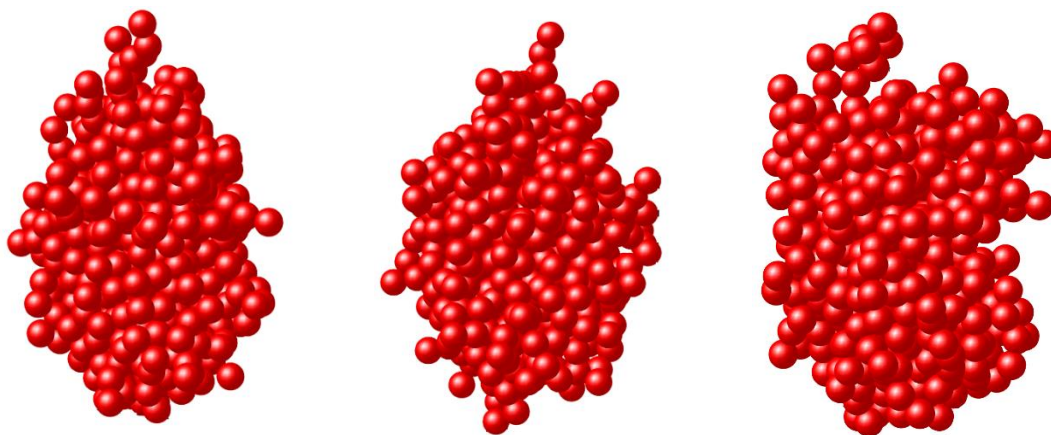


Рис. 3. Примеры агломератов из 100 частиц сажи.

Как видно из рисунка 3 такой подход к конфигурации агломератов обеспечивает достаточно плотную упаковку частиц углерода. При этом края остаются неровными, что соответствует снимкам растрового электронного микроскопа.

Реальные снимки сканирующего электронного микроскопа не позволяют определить количество частиц в одном агломерате, а только его линейные

размеры. Снимки показывают только основной массив частиц. Поэтому в качестве видимого размера будем считать сферу, включающую в себя 90 % частиц углерода, входящих в агломерат. График зависимости отношения диаметра агломерата d к радиусу одной частицы r_c от числа частиц, входящих в него N_a представлен на рисунке 4.

Для аппроксимации данной зависимости используем приближение, используемое для оценки размеров атомных ядер.

$$d / r_c = AN_a^{1/3}, \quad (1)$$

где A – коэффициент пропорциональности, зависящий от плотности упаковки частиц. Для проверки верности данного предположения построим график зависимости $(d / r_c)^3$ от N_a (Рисунок 5).

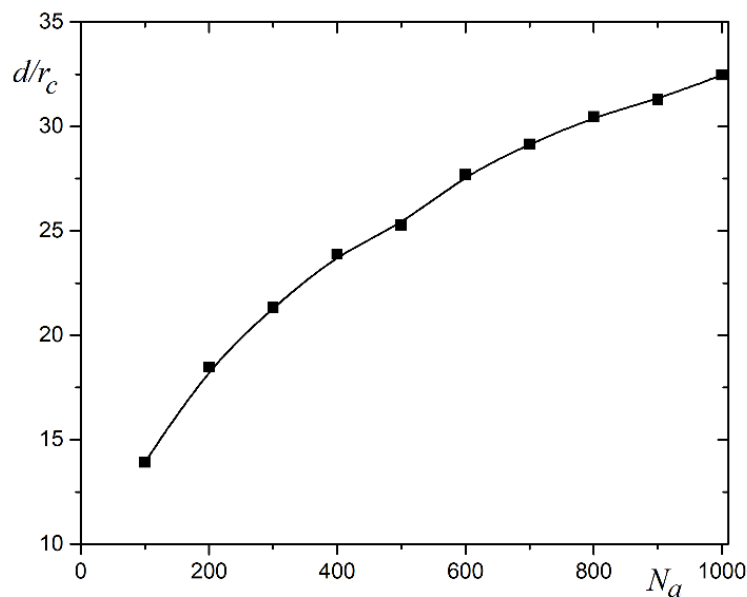


Рис. 4. График зависимости отношения диаметра агломерата d к радиусу одной частицы r_c от числа частиц N_a , входящих в него.

График на рисунке 5 является линейным, что позволяет говорить о верности формулы (1). По углу наклона прямой может быть определен коэффициент $A = 3,29$. Зависимость числа частиц от диаметра агломерата описывается формулой:

$$N_a = 0.029(d / r_c)^3. \quad (2)$$

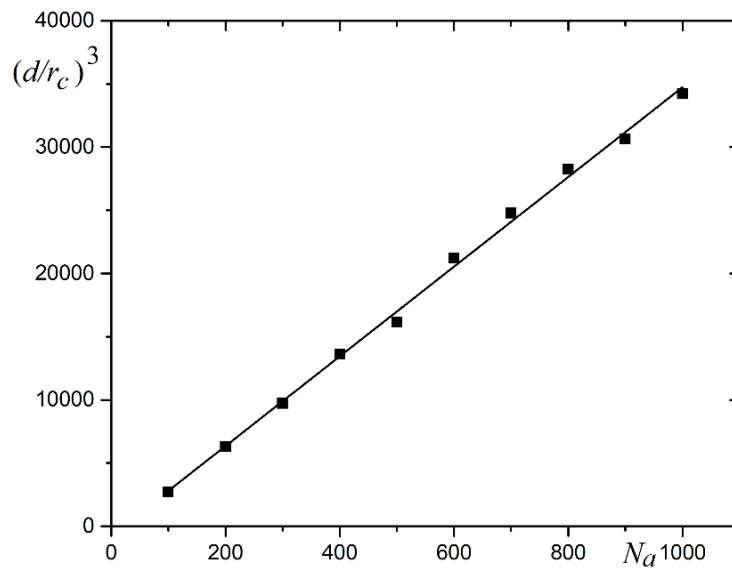


Рис. 5. График зависимости куба относительного диаметра агломерата $(d/r_c)^3$ от количества частиц сажи N_a в нем.

Второй шаг моделирования состоит в формировании сети агломератов в полимерной матрице. Количество и размер агломератов зависит от объемной концентрации частиц углерода n . В вычислительном эксперименте исследовался кубический образец размером $L \times L \times L$. В этом случае количество частиц углерода:

$$N = 3nL^3 / (4\pi r_c^3). \quad (3)$$

Размеры агломератов варьируются в широком диапазоне. Встречаются как достаточно большие агломераты, так и отдельные частицы сажи. При моделировании будем считать, что размеры агломерата являются случайной величиной с равномерным распределением в интервале от 1 до d_m . d_m – максимальный размер агломерата, наблюдаемый в эксперименте. Более удобно проводить моделирование по числу частиц в агломерате. Для этого определим по формуле (2) число частиц N_m соответствующее агломерату размером d_m . Вероятность появления агломерата с любым числом частиц в интервале $[1, \dots, N_m]$ равна $p = 1/N_m$.

Для выработки массива агломератов адаптируем алгоритм Метрополиса, активно применяемый при моделировании магнитных явлений. На каждом

шаге вырабатывается две случайных величины $N_{ai} \in [1, \dots, N_m]$ и $p_i \in [0, 1]$. Если $p_i > p$, то создается агломерат с числом частиц N_{ai} . Это количество частиц вычитается из общего числа частиц сажи $N' = N - N_{ai}$. Если оставшееся число частиц N' меньше, чем N_m , то размеры новых агломератов выбираются из интервала $[1, \dots, N']$. Алгоритм заканчивает работу при исчерпании всех частиц сажи. Созданные агломераты распределяются случайным образом по кубу размером $L \times L \times L$. Также каждый агломерат случайным образом поворачивается в пространстве.

2. Моделирование электропроводящих путей

Основной целью моделирования является определение объемной концентрации частиц сажи, при которых происходит перколяционный фазовый переход электрической проводимости. Композитный материал становится электрическим проводником, если частицы сажи образуют проводящий путь. Проводящий путь может сформироваться случайным образом при достаточно низкой концентрации частиц сажи. Вероятность возникновения проводящего пути растет с увеличением концентрации частиц. Цель моделирования определить зависимость вероятности возникновения проводимости в зависимости от концентрации частиц.

Поиск проводящих путей выполняется в два этапа. На первом этапе строится граф связей между агломератами. На втором этапе в графе связей ищутся пути, обеспечивающие электрическую проводимость.

Вершинами V графа связей $G = (V, E)$ являются центры агломератов. В качестве таких центров могут быть использованы частицы, которые служат зерном при формировании агломерата. При моделировании структуры композита агломераты распределяются случайно в пространстве. Для поиска проводящих путей необходимо построить полно связный взвешенный граф. Множество ребер E соответствует множеству пар вершин. Вес ребра равен d расстоянию между агломератами. Расстояние $d(v_i, v_j)$ между агломератами v_i

и v_j равно минимальному расстоянию между частицами входящими в разные агломераты. Вычисление состоит в прямом переборе пар частиц, принадлежащих разным агломератам, вычислению расстояния между ними и определению минимума по множеству расстояний. Если агломераты пересекаются или соприкасаются, то расстояние между ними считается нулевым.

Кроме прямого соприкосновения возможен механизм проводимости, связанный с туннельным эффектом. Если стоит задача определения наличия проводимости, то достаточно знать максимальное расстояние между частицами, при котором наблюдается электрический ток. Обозначим эту величину через d_e . В этом случае композит становится проводником, если в графе существует путь, каждое ребро которого имеет длину не более d_e . Экспериментально проводимость образца измеряется между какими-то двумя противоположными гранями. Все направления в представленной модели равнозначны. Поэтому будем измерять проводимость вдоль оси OX . В этом случае задача проверки наличия проводящего пути сводится к поиску пути на графе G , каждое ребро которого имеет длину не более d_e , при этом начало пути находится на расстоянии не более d_e от плоскости с уравнением $x = 0$. Конец пути должен находиться на расстоянии не более dm от плоскости $x = L$.

Для поиска таких путей используем алгоритм кластеризации графа. На первом этапе ищем вершины графа, расположенные на расстоянии не более d_e от плоскости $x = 0$. Эти вершины используются в качестве зерна для выращивания сегмента. Расстояние от вершины до плоскости равно минимальному расстоянию частиц агломерата, соответствующего вершине, до этой плоскости. Если таких вершин нет, то алгоритм заканчивает работу и проводящие пути отсутствуют. Если необходимое зерно существует, то строится кластер. Если зерен несколько, то для каждого из них строится свой кластер. Проводящий путь существует, если в построенном кластере присутствует вершина, расстояние от которой до плоскости $x = L$ не превышает d_e . Если обнаружен такой кластер, то алгоритм заканчивает работу.

Построение кластера будем выполнять итерационным методом. На нулевом шаге кластер включает одну вершину $C_0 = \{v_0\}$. v_0 – это зерно кластера. Пусть на шаге k кластер содержит n_k вершин $C_k = \{v_0, v_1, \dots, v_{n_k}\}$. Расстоянием $d(C_k, v_j)$ от кластера C_k до вершины v_j будем считать минимальное расстояние между вершиной v_j и вершинами кластера C_k .

$$d(C_k, v_j) = \min_{v_i \in C_k} d(v_i, v_j). \quad (4)$$

Итерационный шаг алгоритма состоит в том, что перебираются все вершины графа v_j не входящие в кластер C_k ($v_j \in C_k \setminus V$) и вычисляется расстояние от этих вершин до кластера $d(C_k, v_j)$. Если $d(C_k, v_j) \leq d_e$, то вершина добавляется к кластеру C_{k+1} . Алгоритм заканчивает работу, если на каком-то итерационном шаге к кластеру не добавляется ни одной вершины.

После того как кластер построен, осуществляется вычисление расстояния от всех его вершин до плоскости $x = L$. Если в кластере присутствует вершина, отстоящая от плоскости $x = L$ не более, чем на d_e , то проводящий путь найден. Если такой вершины нет, то происходит переход к следующему зерну кластера.

Данный алгоритм имеет асимптотическую сложность $O(N^2)$.

Остановимся на определении минимального расстояния между агломератами d_e , обеспечивающим электрическую проводимость. Проводимость при отсутствии контактов обеспечивается перескоком электронов между агломератами, происходящего в силу квантового туннельного эффекта. Как хорошо известно, данный эффект затухает по экспоненциальному закону. В ряде работ [21,31,32] показано, что предельным расстоянием между агломератами, допускающим туннельный эффект, является размер одной частицы сажи. Поэтому в дальнейшем будем считать, что $d_e = r_c$.

3. Результаты компьютерного эксперимента

В компьютерном эксперименте исследовались системы с объемной концентрацией частиц сажи от $n = 0\%$ до $n = 0\%$. В реальном эксперименте, как правило, измеряются массовые концентрации частиц сажи. Для пересчета результатов компьютерного эксперимента необходимо знать плотность сажи ρ_c и плотность полимера ρ_p , на основе которого реализуется композитный материал. В этом случае, массовая концентрация n_m может вычислена на основе объемной концентрации n по формуле:

$$n_m = n\rho_c / ((\rho_c - \rho_p)n + \rho_p). \quad (5)$$

Для малых значений концентрации частиц сажи используя разложение в степенной ряд по n можно записать:

$$n_m = n\rho_c / \rho_p \left(1 - (\rho_c - \rho_p)n / \rho_p \right). \quad (6)$$

Например, для композитного материала на основе высокоплотного полиэтилена с $\rho_p = 950 \text{ кг/м}^3$, модифицированного частицами сажи с плотностью $\rho_c = 1800 \text{ кг/м}^3$, получаем соотношение:

$$n_m = 1,89n(1 - 0,89n). \quad (7)$$

Для максимально возможного количества частиц в одном агломерате было использовано значение $N_m = 400$ [34].

В компьютерном эксперименте все длины измеряются в относительных единицах. Выберем в качестве единицы длины радиус частиц сажи r_c . Еще одним характерным параметром является размер образца композитного материала L . Для расчетов задается отношение L/r_c . Для реальных систем порядок величины размера частиц сажи $r_c = 5 \text{ нм}$. Для реальных образцов размеры должны быть не менее $L = 1 \text{ мм}$. В этом случае $L/r_c = 2 \times 10^5$. Однако расчеты для подобных систем требуют значительных вычислительных ресурсов и времени. Поэтому был использован метод конечно-размерного скейлинга, активно применяемый

при моделировании спиновых систем методом Монте-Карло [35]. Основная идея конечно-размерного скейлинга состоит в исследовании систем с несколькими конечными линейными размерами и аппроксимация их на бесконечные системы.

Были исследованы системы с линейными размерами от $L/r_c = 100$ до $L/r_c = 200$ с шагом $\Delta L/r_c = 25$. Для каждого размера системы моделировалась случайная конфигурация агломератов частиц сажи и определялась возможность протекания тока от грани, задаваемой уравнением $x = 0$, до грани с уравнением $x = L$. Такая возможность существует, если существует цепочка агломератов, разделенных расстоянием не более d_e . Для каждого размера системы и каждой концентрации частиц сажи n эксперимент повторялся 100 раз. После этого определялась частота появления проводящего пути, которая принималась равной вероятности p возникновения проводящего пути в композите. Для каждого значения размера системы строился график зависимости вероятности p от L/r_c . Полученная зависимость аппроксимировалась на случай $L/r_c \rightarrow \infty$. На рисунке 6 приведены зависимости вероятности проводимости p от размера системы L/r_c для концентрации частиц сажи $n = 6\%$ и $n = 8\%$.

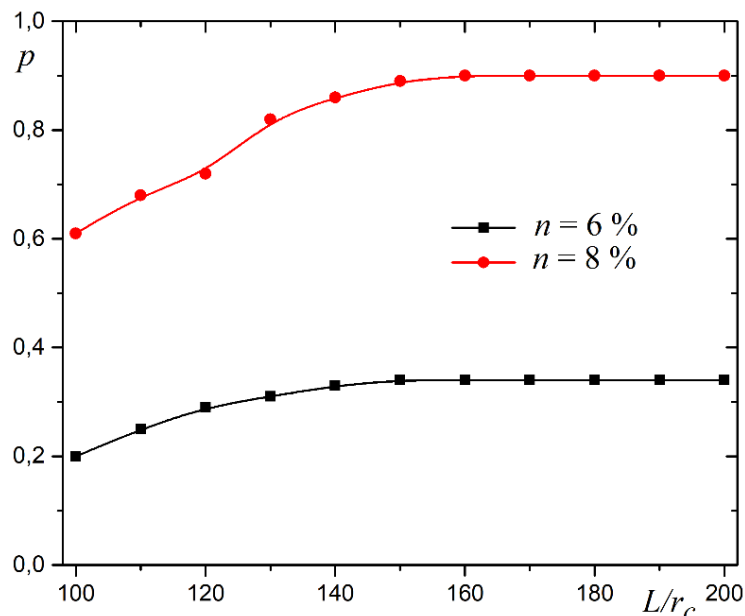


Рис. 6. Зависимость вероятности проводимости p от размера системы L/r_c для двух концентраций частиц сажи: $n = 5\%$ и $n = 8\%$.

Как видно из графиков на рисунке 6 вероятности возникновения проводящих путей достаточно быстро сходятся некоторому предельному значению, поэтому в дальнейшем можно ограничиться расчетами для $L/r_c = 150$. Зависимость вероятности p возникновения электрической проводимости в композитном материале от концентрации частиц сажи n представлена на рисунке 7.

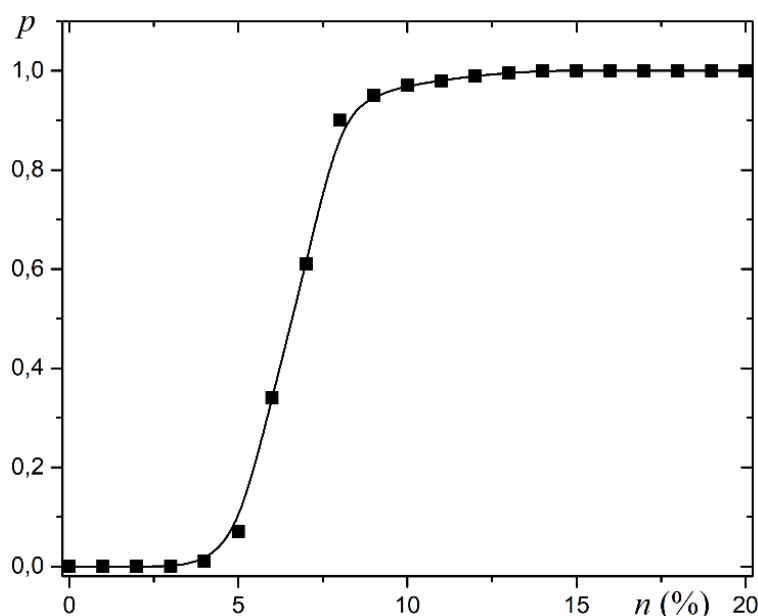


Рис. 7. Зависимость вероятности проводимости p от концентрации частиц сажи n .

Как видно из графика на рисунке 7 при концентрации частиц сажи ниже 5 % вероятность электрической проводимости является практически нулевой. При повышении концентрации происходит резкий рост вероятности получения проводящего композита. В системе происходит перколяционный переход из состояния диэлектрика в состояние проводника. При концентрации частиц сажи более 15 % композит с вероятностью равной единице является проводящим.

Заключение

Проведем сравнение полученных результатов с данным других исследований. Экспериментальные исследования показывают, что порог электрической перколяции наблюдается при массовой концентрации углеродного наполнителя 23-27 % [36]. Полученное в результате компьютерного

моделирование значение объемной концентрации 15 %, обеспечивающей проводимость, при пересчете по формуле (7) дает массовую концентрацию 24,6 %, что хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Ранее при моделировании композитов с наполнителем из технического углерода использовалась модель агломератов в виде шаров. Такое моделирование дает завышенные значения вероятности проводимости. Так в статье [26] для объемной концентрации частиц получена вероятность проводимости близкая к 0,5. Расчеты, выполненные в данной работе для концентрации 6 %, дают значение 0,34, что существенно ниже. Форма агломератов, отличная от сферической снижает вероятность туннелирования электронов и, как следствие, возникновения проводящих путей.

Предложенная модель несферических агломератов обладает большим потенциалом, так как позволяет учитывать размеры исходных частиц сажи и более точно рассчитывать проводимость полученных кластеров из частиц. Однако для вычисления сопротивления требуется развитие модели для расчета проводника сложной формы, получаемой при кластеризации.

Финансирование: Исследования поддержаны грантом РНФ № 26-29-20003 и соглашением №23 с Омской областью от 08.07.2026.

Литература

1. Selvakumaran L., Lubineau G. Electrical behavior of laminated composites with intralaminar degradation: A comprehensive micro-meso homogenization procedure //Composite Structures. – 2014. – Т. 109. – С. 178-188.
<https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2013.10.057>
2. de Souza Vieira L. et al. Carbon-based materials as antistatic agents for the production of antistatic packaging: a review //Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2021. – Т. 32. – №. 4. – С. 3929-3947.
<https://doi.org/10.1007/s10854-020-05178-6>

3. Zhang W. et al. Advances in waterborne polymer/carbon material composites for electromagnetic interference shielding //Carbon. – 2021. – Т. 177. – С. 412-426. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.02.093>
4. Shakir M. F. et al. EMI shielding characteristics of electrically conductive polymer blends of PS/PANI in microwave and IR region: Shakir, Abdul Rashid, Tariq, Nawab, Afzal, Nabeel, Naseem, and Hamid //Journal of Electronic Materials. – 2020. – Т. 49. – №. 3. – С. 1660-1665. <https://doi.org/10.1007/s11664-019-07631-7>
5. Lyu L. et al. Extracting carrier mobility using a photoinduced charge transfer reaction: From conducting polymers to nanocarbon materials //Organic Electronics. – 2020. – Т. 78. – С. 105615. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2020.105615>
6. Gómez I. J. et al. Carbon nanomaterials embedded in conductive polymers: A state of the art //Polymers. – 2021. – Т. 13. – №. 5. – С. 745. <https://doi.org/10.3390/polym13050745>
7. Bertolini M. C. et al. Hybrid composites based on thermoplastic polyurethane with a mixture of carbon nanotubes and carbon black modified with polypyrrole for electromagnetic shielding //Frontiers in Materials. – 2020. – Т. 7. – С. 174. <https://doi.org/10.3389/fmats.2020.00174>
8. Zhao L., Xia W., Zhang P. Economical conductive graphite-filled polymer composites via adjustable segregated structures: Construction, low percolation threshold, and positive temperature coefficient effect //Journal of Applied Polymer Science. – 2021. – Т. 138. – №. 17. – С. 50295. <https://doi.org/10.1002/app.50295>
9. Al-Saleh M. H., Sundararaj U. A review of vapor grown carbon nanofiber/polymer conductive composites //Carbon. – 2009. – Т. 47. – №. 1. – С. 2-22. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2008.09.039>
10. Wu J., Pisula W., Müllen K. Graphenes as potential material for electronics //Chemical reviews. – 2007. – Т. 107. – №. 3. – С. 718-747. <https://doi.org/10.1021/cr068010r>

11. Selvakumaran L., Lubineau G. Electrical behavior of laminated composites with intralaminar degradation: A comprehensive micro-meso homogenization procedure //Composite Structures. – 2014. – T. 109. – C. 178-188. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2013.10.057>
12. Lv Z. et al. Scalable manufacturing of conductive rubber nanocomposites with ultralow percolation threshold for strain sensing applications //Composites Communications. – 2021. – T. 25. – C. 100685. <https://doi.org/10.1016/j.coco.2021.100685>
13. Sengun P. et al. Characterization of designed, transparent and conductive Al doped ZnO particles and their utilization in conductive polymer composites //Powder Technology. – 2020. – T. 374. – C. 214-222. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.07.025>
14. Pawłowska M., Sikorski A. Monte carlo study of the percolation in two-dimensional polymer systems //Journal of Molecular Modeling. – 2013. – T. 19. – №. 10. – C. 4251-4258. <https://doi.org/10.1007/s00894-013-1892-y>
15. Oh J. Y. et al. Enhanced electrical networks of stretchable conductors with small fraction of carbon nanotube/graphene hybrid fillers //ACS applied materials & interfaces. – 2016. – T. 8. – №. 5. – C. 3319-3325. <https://doi.org/10.1021/acsami.5b11205>
16. Chanklin W., Laowongkot J., Chibante L. P. F. Electrical property validation of percolation modeling in different polymer structures of carbon-based nanocomposites //Materials today Communications. – 2018. – T. 17. – C. 153-160. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2018.09.004>
17. Tang Z. H. et al. Modeling the synergistic electrical percolation effect of carbon nanotube/graphene/polymer composites //Composites Science and Technology. – 2022. – T. 225. – C. 109496. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2022.109496>
18. Rahaman M. et al. A new insight in determining the percolation threshold of electrical conductivity for extrinsically conducting polymer composites through different sigmoidal models //Polymers. – 2017. – T. 9. – №. 10. – C. 527. <https://doi.org/10.3390/polym9100527>

19. Feng C., Jiang L. Micromechanics modeling of the electrical conductivity of carbon nanotube (CNT)–polymer nanocomposites //Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. – 2013. – Т. 47. – С. 143-149. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2012.12.008>
20. Qu F. et al. Synergistic effect in improving the electrical conductivity in polymer nanocomposites by mixing spherical and rod-shaped fillers //Soft Matter. – 2020. – Т. 16. – №. 46. – С. 10454-10462. <https://doi.org/10.1039/D0SM00993H>
21. Wang Y. et al. Microstructural modeling and simulation of a carbon black-based conductive polymer— a template for the virtual Design of a Composite Material //ACS omega. – 2022. – Т. 7. – №. 33. – С. 28820-28830. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c01755>
22. Azizi S. et al. Electrical and thermal phenomena in low-density polyethylene/carbon black composites near the percolation threshold //Journal of Applied Polymer Science. – 2019. – Т. 136. – №. 6. – С. 47043. <https://doi.org/10.1002/app.47043>
23. Li F. et al. Polyurethane/conducting carbon black composites: structure, electric conductivity, strain recovery behavior, and their relationships //Journal of Applied Polymer Science. – 2000. – Т. 75. – №. 1. – С. 68-77. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-4628\(20000103\)75:1<68::AID-APP8>3.0.CO;2-I](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4628(20000103)75:1<68::AID-APP8>3.0.CO;2-I)
24. Cruz S. M., Viana J. C. Melt blending and characterization of carbon nanoparticles-filled thermoplastic polyurethane elastomers //Journal of Elastomers & Plastics. – 2015. – Т. 47. – №. 7. – С. 647-665. <https://doi.org/10.1177/0095244314534097>
25. Vas J. V., Joy Thomas M. Monte Carlo modelling of percolation and conductivity in carbon filled polymer nanocomposites //IET Science, Measurement & Technology. – 2018. – Т. 12. – №. 1. – С. 98-105. <https://doi.org/10.1049/iet-smt.2017.0093>

26. Arun D. I. et al. Experimental and Monte Carlo simulation studies on percolation behaviour of a shape memory polyurethane carbon black nanocomposite //Smart Materials and Structures. – 2019. – Т. 28. – №. 5. – С. 055010. <https://doi.org/10.1088/1361-665X/ab083b>
27. Ji J. et al. A simulation for the electrical conductivity of nanocomposites filled with carbon black based on the three-dimensional Monte Carlo method //Polymer Science, Series A. – 2021. – Т. 63. – №. 2. – С. 196-207. <https://doi.org/10.1134/S0965545X21020048>
28. Coupette F. et al. Percolation of rigid fractal carbon black aggregates //The Journal of Chemical Physics. – 2021. – Т. 155. – №. 12. <https://doi.org/10.1063/5.0058503>
29. Zhu X. et al. A study of the appropriateness, geometry, size, and fillers boundary restraint on representative volume element in electrical simulation for carbon-based nanocomposites //Materials Today Communications. – 2020. – Т. 25. – С. 101639. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101639>
30. Mazaheri M., Payandehpeyman J., Jamasb S. Modeling of effective electrical conductivity and percolation behavior in conductive-polymer nanocomposites reinforced with spherical carbon black //Applied Composite Materials. – 2022. – Т. 29. – №. 2. – С. 695-710. <https://doi.org/10.1007/s10443-021-09991-y>
31. Clingerman M. L. et al. Evaluation of electrical conductivity models for conductive polymer composites //Journal of Applied Polymer Science. – 2002. – Т. 83. – №. 6. – С. 1341-1356. <https://doi.org/10.1002/app.10014>
32. Min C. et al. The electrical properties and conducting mechanisms of carbon nanotube/polymer nanocomposites: A review //Polymer-Plastics Technology and Engineering. – 2010. – Т. 49. – №. 12. – С. 1172-1181. <https://doi.org/10.1080/03602559.2010.496405>
33. Simmons J. G. Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film //Journal of applied physics. – 1963. – Т. 34. – №. 6. – С. 1793-1803. <https://doi.org/10.1063/1.1702682>
34. Coupette F. et al. Percolation of rigid fractal carbon black aggregates //The Journal of Chemical Physics. – 2021. – Т. 155. – №. 12. <https://doi.org/10.1063/5.0058503>

35. Landau D. P., Binder K. Phase diagrams and multicritical behavior of a three-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnet //Physical Review B. – 1978. – Т. 17. – №. 5. – С. 2328. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.17.2328>
36. Степашкина А. С. и др. Моделирование электропроводности композитных материалов, полученных на основе полипропилена и технического углерода //Письма в журнал технической физики. – 2015. – Т. 41. – №. 2. – С. 7-14. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063785015010307>

Для цитирования:

Белим С.В. Компьютерное моделирование электрической проводимости полимерных композитов с углеродным наполнителем. // Журнал радиоэлектроники. – 2026. – № 8. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2026.8.11>