

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ

DOI: 10.18698/1812-3368-2016-1-76-89

УДК 539.8

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ АСИМПТОТИЧЕСКОГО ОСРЕДНЕНИЯ

Ю.И. Димитриенко, Е.А. Губарева, М.Н. Маркевич, С.В. Сборщиков

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация
e-mail: dimit.bmstu@gmail.com; gubareva_ea@pochta.ru;
mamarkevi@gmail.com; servasbor@gmail.com

Предложена математическая модель для расчета эффективных диэлектрических свойств композиционных материалов, модифицированных нановключениями, при воздействии внешнего переменного электрического поля. Модель основана на методе асимптотического осреднения дифференциальных уравнений электродинамики с быстроосциллирующими коэффициентами. Сформулирована локальная задача электродинамики на ячейке периодичности композита, для ее решения применен метод конечных элементов, реализованный в рамках программного комплекса SMCM, разработанного в НОЦ "СИМПЛЕКС" МГТУ им. Н.Э. Баумана, с использованием CSIR-схемы хранения разряженных матриц и метода бисопряженных градиентов. Проведен цикл расчетов эффективной комплексной диэлектрической проницаемости полимерного композита с различными концентрациями углеродных нанотрубок. Теоретически обоснован эффект влияния кластерных образований нанотрубок на возникновение немонотонной концентрационной зависимости диэлектрической проницаемости композита. Проведен анализ частотной зависимости тангенса угла диэлектрических потерь, получено хорошее совпадение с экспериментальными данными.

Ключевые слова: наноструктурированные композиционные материалы, метод асимптотического осреднения, углеродные нанотрубки, эффективная диэлектрическая проницаемость, метод конечных элементов.

MATHEMATICAL MODELLING OF DIELECTRIC PROPERTIES OF NANOSTRUCTURAL COMPOSITES USING ASYMPTOTIC HOMOGENIZING METHOD

Yu.I. Dimitrienko, E.A. Gubareva, M.N. Markevich, S.V. Sborshchikov

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation
e-mail: dimit.bmstu@gmail.com; gubareva_ea@pochta.ru;
mamarkevi@gmail.com; servasbor@gmail.com

The paper presents a mathematical model for calculating effective dielectric properties of the composites modified by nanoinclusionson exposure to the external oscillating electrical field. The model is based on the asymptotic homogenizing method for differential equations of electrodynamics with rapidly oscillating coefficients. The local problem of electrodynamics on a composite periodicity cell is

formulated. To solve the problem, the authors use the method of finite elements implemented in the SMCМ software package developed in the Scientific Educational Center SIMPLEX at Bauman Moscow State Technical University. Both the CSIR storage schemes of discharged matrices and the method of biconjugate gradients are used. A settlement cycle of complex effective inductive capacity of a polymer composite with different carbon nanotube concentrations is performed. The authors consider the influence of nanotube cluster formations on generation of the nonmonotonous concentration dependence of the composite inductive capacity. The analysis of frequency dependence of dielectric loss tangent is carried out resulting in a good agreement with the experimental data.

Keywords: nanostructural composites, asymptotic homogenizing method, carbon nanotubes, effective inductive capacity, method of finite elements.

Введение. Полимерные композиционные материалы, модифицированные нановключениями, вызывают повышенный интерес для создания материалов и покрытий с заданными радиотехническими характеристиками [1]. Углеродные нанотрубки в качестве наполнителя композита находят применение в различных областях техники, включая микроволновые устройства. При относительно тонких слоях полимерного композита и малых весовых объемных долях нанотрубок в широком диапазоне частот (до 5 ГГц) обеспечивается значительный коэффициент поглощения электромагнитного излучения СВЧ-диапазона [2–4].

В настоящее время одним из наиболее перспективных методов моделирования различных физических процессов в сильно неоднородных средах, в том числе композитах, является метод гомогенизации (метод асимптотического осреднения, MAO) дифференциальных уравнений с частными производными), основные принципы которого разработаны Н.С. Бахваловым, Е. Санчес-Паленсией, А. Бенсуссаном [5–7]. Однако в настоящее время существует очень мало работ, посвященных применению MAO для расчета электромагнитных характеристик композитов. В основном, эти работы ограничены поиском эффективных характеристик композитов, обладающих достаточно простой геометрической структурой [8]. Аналитическим методам расчета эффективных характеристик композитов посвящены, в частности работы [9, 10]. Для расчета эффективных свойств сложноструктурированных композиционных материалов, к которым относятся композиты, наполненные наноструктурными частицами, в том числе нанотрубками, необходима разработка вычислительного алгоритма решения полных трехмерных задач электродинамики на ячейках периодичности неоднородной структуры. Для этого в настоящей работе предложено использовать вычислительные технологии, разработанные для расчета упруго-прочностных характеристик композиционных материалов со сложными структурами армирования [11–15], которые основаны на конечно-элементной реализации MAO.

Решение серии L_p задач и расчет эффективных диэлектрических характеристик композита. Рассмотрим композиционный материал, занимающий в пространстве R^3 область V с поверхностью Σ и подверженный воздействию переменного электрического поля $\vec{E}(t) = \vec{E}^* e^{i\omega t}$, где \vec{E} — вектор напряженности электрического поля; ω — угловая частота. Область композита V состоит из N фаз ($V = \bigcup_{\alpha=1}^N V_\alpha$): V_α , $\alpha = \overline{1, N-1}$ — наполнители; V_N — матрица. Предполагается, что компоненты композита изотропны, характерный размер l наполнителей (неоднородностей) намного меньше характерного размера рассматриваемой области композита ($l \ll L$). Для описания установившихся электромагнитных колебаний, длина волны $\lambda = c/\omega$ которых много больше характерного размера l неоднородностей $\lambda \gg l$ (при $l = 1000$ нм этому условию соответствует широкий диапазон частот $f = \omega/(2\pi) < 10^{14}$ Гц), в каждой области V_α , $\alpha = 1, \dots, N$, композита справедлива система уравнений электростатики, являющаяся следствием уравнений Максвелла [16, 17]:

$$\begin{aligned} \partial_i D_i^{*\alpha} &= 0, & x_i &\in V_\alpha; \\ D_i^{*\alpha} &= \varepsilon^{*\alpha} E_i^{*\alpha}, & x_i &\in V_\alpha \cup \Sigma_\alpha; \\ E_i^{*\alpha} &= \partial_i \varphi^{*\alpha}, & x_i &\in V_\alpha \\ \varphi^{*\alpha} &= \varphi^{*N}, (D_i^{*\alpha} - D_i^{*N})n_i = 0, & x_i &\in \Sigma_{\alpha N}; \\ \varphi^{*\alpha}|_{\Sigma_{\alpha e}^1} &= \varphi_e^*, D_i^{*\alpha} n_i|_{\Sigma_{\alpha e}^2} = D_e^{*\alpha}, & x_i &\in \Sigma_{\alpha N}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $D_i^{*\alpha}$ — компоненты комплексной амплитуды вектора электрической индукции; $E_i^{*\alpha}$ — компоненты комплексной амплитуды вектора напряженности электрического поля; $\varphi^{*\alpha}$ — комплексная амплитуда электрического потенциала; $\varepsilon^{*\alpha}$ — комплексная амплитуда диэлектрической проницаемости α -й фазы композита; Σ_α — поверхности областей V_α ; $\Sigma_{\alpha N}$ — поверхности контакта матрицы и наполнителя; $\Sigma_{\alpha e}$ — часть поверхности Σ композита, занятая α -й фазой (для наполнителя $\Sigma_\alpha = \Sigma_{\alpha N} \cup \Sigma_{\alpha e}$ и для матрицы $\Sigma_N = \bigcup_{\alpha=1}^{N-1} \Sigma_{\alpha N} \cup \Sigma_{Ne}$).

Для композиционного материала с характерным размером l ячейки периодичности (ЯП) введем малый параметр $\kappa = l/L \ll 1$ и две безразмерные координаты $\bar{x}_i = x_i/L$ (глобальные), $\xi_i = \bar{x}_i/\kappa = x_i/l$ (локальные), где x_i — декартовы координаты. В силу периодичности структуры композита периодической функцией является диэлектрическая проницаемость $\varepsilon^*(x_i) = \varepsilon^*(x_i + a_i)$, a_i — длина сторон ЯП, поэтому ее можно рассматривать как функцию $\varepsilon^*(\xi_i)$. Для электрического потенциала φ^* строится асимптотического разложения по параметру κ :

$$\begin{aligned} \varphi^*(\bar{x}_i, \xi_j) &= \\ &= \varphi^{*(0)}(\bar{x}_i) + \kappa \varphi^{*(1)}(\bar{x}_i, \xi_j) + \kappa^2 \varphi^{*(2)}(\bar{x}_i, \xi_j) + \dots + \kappa^n \varphi^{*(n)}(\bar{x}_i, \xi_j) = \\ &= \varphi^{*(0)}(\bar{x}_i) + \sum_{n=1}^{\infty} \kappa^n \varphi^{*(n)}(\bar{x}_i, \xi_j). \end{aligned} \quad (2)$$

Подставляя разложение (2) в систему (1) и собирая члены при разных членах разложения, для объема ЯП $V_\xi = \{\xi_j : -\frac{a_j}{2} < \xi_j < \frac{a_j}{2}, j = \overline{1, 3}\}$ получаем следующую постановку задачи электростатики в нулевом приближении:

$$\begin{aligned} D_{i/i}^{*\alpha(0)} &= 0, & x_i &\in V_{\xi\alpha}; \\ D_i^{*\alpha(0)} &= \varepsilon^{*\alpha} E_i^{*\alpha(0)}, & x_i &\in V_{\xi\alpha}; \\ E_i^{*\alpha(0)} &= \bar{E}_i^* + \varphi_{/i}^{*\alpha(1)}, & x_i &\in V_{\xi\alpha}; \\ \varphi^{*\alpha(1)} &= \varphi^{*N(1)}, (D_i^{*\alpha(0)} - D_i^{*N(0)})n_i = 0, & x_i &\in \Sigma_{\xi\alpha N}; \\ \langle \varphi^{*\alpha(1)} \rangle &= 0, [[D_i^{*(0)}]]n_i = 0, [[\varphi^{*\alpha(1)}]] = 0, & x_i &\in \Sigma_{\xi\alpha N}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\langle \varphi^{*(1)} \rangle$ — операция осреднения по ЯП; $[[\varphi^{*(1)}]]$ — условия периодичности; \bar{E}_i^* — средняя напряженность композита.

Задача (3) содержит условия нормировки в виде интегральных уравнений Вольтера первого рода и условия периодичности на границе ЯП, что создает определенные трудности при ее численном решении. Для преобразования этой задачи к задаче с классическими граничными условиями вводим функции псевдопотенциала $\vartheta_{(p)}^{*\alpha}(\xi_k)$:

$$\varphi^{*\alpha(1)} = \sum_{p=1}^3 \varphi_{(p)}^{*\alpha}, \quad (4)$$

где $\varphi_{(p)}^{*\alpha} = -\bar{E}_i^* \xi^p + \vartheta_{(p)}^{*\alpha}(\xi_k)$; $\vartheta_{(p)}^{*\alpha}(\xi_k)$ — новые неизвестные функции ξ_k , не являющиеся периодическими.

Рассмотрим случай композитов, ЯП которых обладает центральной симметрией относительно начала локальных координат. Для таких композитов вместо решения на всей ЯП V_ξ можно рассмотреть решение на $1/8$ ЯП $\tilde{V}_\xi : \tilde{V}_\xi = V_\xi \cap (\xi_i \geq 0)$. Используя выражения (4), получаем группу трех задач электродинамики композита на $1/8$ ЯП (назовем их задачами L_p):

$$\begin{aligned} D_{i(p)/i}^{*\alpha} &= 0; \\ D_{i(p)}^{*\alpha} &= \varepsilon^{*\alpha} E_{i(p)}^{*\alpha}, \quad x_i \in (\tilde{V}_\xi \cup \Sigma'_s \cup \Sigma_s); \\ E_{i(p)}^{*\alpha} &= \vartheta_{(p)/i}^{*\alpha}, \quad x_i \in \tilde{V}_\xi; \\ \vartheta_{(p)}^{*\alpha} &= \vartheta_{(p)}^{*N}, \quad (D_{i(p)}^{*\alpha} - D_{i(p)}^{*N})n_i = 0, \quad x_i \in \bar{\Sigma}_{\xi\alpha N}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\bar{\Sigma}_{\xi\alpha N} = \Sigma_{\xi\alpha N} \cap \tilde{V}_{\xi}$ – поверхности контакта компонентов внутри подобласти, координатные плоскости $\Sigma_s = \{\xi_s = 0\}$, торцевые поверхности ЯП $\Sigma'_s = \{\xi_s = 1/2\}$, $s = 1, 2, 3$. К задачам (5) присоединяются граничные условия на 1/8 ЯП

$$\begin{aligned} \vartheta_{(p)}^{*\alpha} \Big|_{\Sigma'_p} &= \frac{a_p}{2} \bar{E}_p^*, \quad \vartheta_{(p)}^{*\alpha} \Big|_{\Sigma_p} = 0; \\ \vartheta_{(p)/i}^{*\alpha} \Big|_{\Sigma_i} &= 0, \quad \vartheta_{(p)/i}^{*\alpha} \Big|_{\Sigma'_i} = 0, \quad p \neq i. \end{aligned} \quad (6)$$

Задачи L_p имеют “классический” вид относительно функций $\vartheta_{(p)}^{*\alpha}(\xi_j)$, т.е. являются контактными задачами электростатики с граничными условиями на поверхности области \tilde{V}_{ξ} .

Компоненты тензора эффективной комплексной диэлектрической проницаемости композита определяются как

$$\bar{\varepsilon}_{ip}^* = \frac{\bar{D}_{i(p)}^*}{\bar{E}_p^*}, \quad (7)$$

где $\bar{D}_{i(p)}^* = \langle D_{i(p)}^{*\alpha} \rangle = \sum_{\alpha=1}^N \int_{V(\alpha)} D_{i(p)}^{*\alpha} dV$ – осредненные по объему ЯП компоненты вектора индукции электрического поля.

Численное моделирование распределения электрического потенциала в ЯП наноструктурированного композита. Вариационная формулировка задач L_p электростатики на области \tilde{V}_{ξ} 1/8 ЯП имеет вид

$$\int_{\tilde{V}_{\xi}} \delta(\vartheta_{(p)/i}^*) \varepsilon \vartheta_{(p)/i}^* dV_{\xi} = \int_{\Sigma_1} \delta \vartheta_{(p)}^* D_{i(p)}^{*e} d\Sigma. \quad (8)$$

Здесь $\bar{D}_{i(p)}^{*e}$ – комплексная амплитуда вектора индукции внешнего поля, заданного на поверхности ЯП композита Σ_1 ; на поверхности Σ_2 заданы нулевые граничные условия; $\delta \vartheta_{(p)}^*$ и $\delta(\vartheta_{(p)/i}^*)$ – виртуальное изменение псевдопотенциала и производная виртуального изменения.

При конечно-элементной реализации [11] вариационная задача (8) сводится к системе линейных алгебраических уравнений

$$[K^*] \{\hat{\vartheta}_{(p)}^*\} = \{f^*\}, \quad (9)$$

где $[K^*]$ – глобальная матрица “жесткости”; $\{\hat{\vartheta}_{(p)}^*\}$ – вектор узловых значений псевдопотенциала $\vartheta_{(p)}^*$ в узлах конечных элементов; $\{f^*\}$ – глобальный столбец внешних нагрузок.

Численное решение системы (9) осуществлялось с применением метода бисопряженных градиентов с ILDU-факторизацией, реализованного в рамках программного комплекса SMCM, разработанного

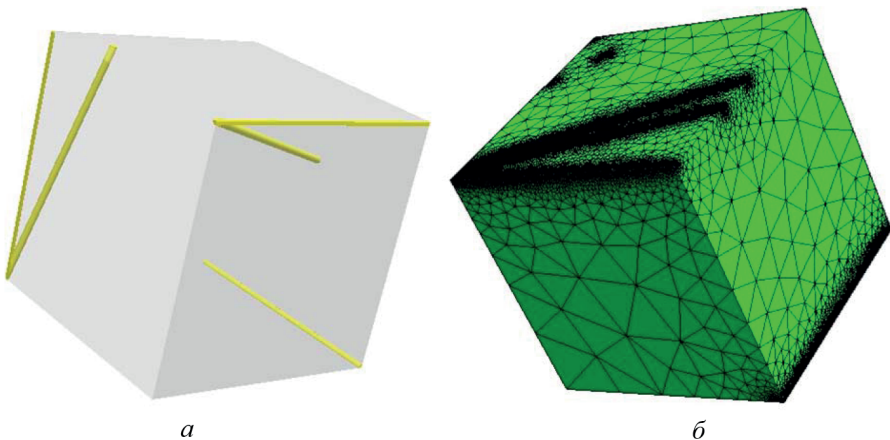


Рис. 1. Геометрическая модель ЯП композита (а), армированного углеродными нанотрубками марки СТ2Н с концентрацией включений около 0,2 масс. %, и конечно-элементная сетка для ЯП (б), использованная в расчетах

в НОЦ “СИМПЛЕКС” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Для повышения эффективности расчетов использован CSIR-метод хранения разреженных матриц.

В качестве объекта математических исследований выбрана ЯП полимерного композита, модифицированного углеродными многостенными нанотрубками марки СТ2Н (рис. 1). Средний диаметр нанотрубок приблизительно 18 нм, аспектное отношение 170.

В рамках тестовых расчетов было вычислено распределение действительной ($Re\vartheta_{(1)}^*$) и мнимой ($Im\vartheta_{(1)}^*$) компонент безразмерного потенциала $\vartheta_{(1)}^*$ электрического поля внутри моделируемого композита для задачи L_1 (рис. 2) при массовой доле нанотрубок примерно 0,4 масс. %.

Расчет эффективных диэлектрических характеристик наноструктурированного композита. В экспериментальных исследованиях полимерных композитов с углеродными нановключениями было обнаружено аномальное поведение действительной и мнимой компонент диэлектрической проницаемости образцов при изменении концентрации нанотрубок [3, 4]. Авторами настоящей работы сформулировано предположение об образовании “агломератов” при определенных значениях концентрации углеродных нанотрубок более 0,5 масс. %. В связи с этим происходит сокращение удельной площади адгезии с последующим уменьшением максвелл-вагнеровской поляризации.

Для проверки предложенной гипотезы проведены расчеты диэлектрической проницаемости наноструктурированного композита с концентрацией углеродных нанотрубок до 1,2 масс. %. Расчет диэлектрических свойств наноструктурированного композита осуществлялся по

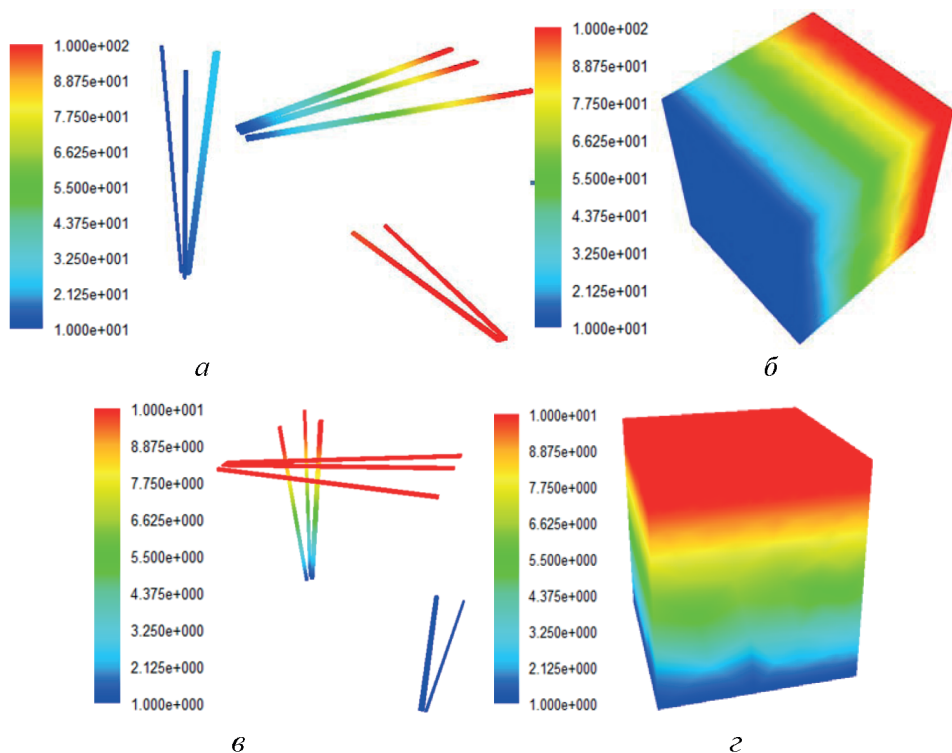


Рис. 2. Распределение действительной $\text{Re}\theta^*_{(1)}$ (а, б) и мнимой $\text{Im}\theta^*_{(1)}$ (в, г) компонент электрического потенциала в объеме углеродных нановключений (а, в) и ЯП композита (б, г)

формулам (7). При значениях массовой доли включений $\psi_f \sim 0,55$ и $0,9$ масс. % в концептуальной модели композита учитывалось образование кластерных пучков и агломератов нанотрубок за счет разности поверхностных энергий эпоксидной смолы и нанотрубок (рис. 3).

В качестве диэлектрических характеристик отдельных компонентов композиционного материала, учитываемых в компьютерной модели, использовались числовые значения комплексных диэлектрических проницаемостей при определенных значениях частот, рассчитанные согласно теории Дебая

$$\varepsilon^* = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 + i\omega\tau}, \quad (10)$$

где ε_∞ — предельно высокочастотная проницаемость; ε_0 — предельная низкочастотная диэлектрическая проницаемость; τ — макроскопическое время релаксации. Выражения для определения значений действительной и мнимой компонент комплексных проницаемостей полимерной матрицы и углеродных нанотрубок согласно (10) имеют вид

$$\varepsilon' = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2}; \quad (11)$$

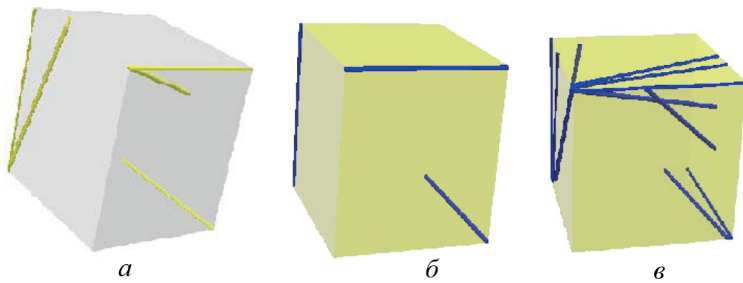


Рис. 3. Геометрические модели полимерного композита, модифицированного нанотрубками при $\psi_f \sim 0,4$ (а), 0,5 (б) (образование агломератов) и 0,8 (в) масс. %

$$\varepsilon'' = \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}. \quad (12)$$

Для определения диэлектрических характеристик полимерной матрицы композита по соотношениям (11), (12) приняты следующие значения: $\tau = 3 \cdot 10^{-3}$ с; $\varepsilon_\infty = 3,1$; $\varepsilon_0 = 4$. Для наполнителя, включающего углеродные нанотрубки марки СТ2Н, определены значения $\tau = 1 \cdot 10^{-5}$ с, $\varepsilon_\infty = 1100$ и $\varepsilon_0 = 1200$.

Оценка адекватности математической модели и точности используемых численных методов получены сравнением расчетных значений эффективных диэлектрических характеристик $\varepsilon' = \text{Re} \bar{\varepsilon}_{11}^*$ и $\varepsilon'' = \text{Im} \bar{\varepsilon}_{11}^*$ с экспериментальными (рис. 4).

При постепенном увеличении концентрации нанотрубок действительная и мнимая компоненты диэлектрической проницаемости полимерного композита монотонно возрастают. Однако при достижении значения массовой доли включений около 0,43 масс. % происходит резкий спад действительной компоненты ε' и более пологий спад у мнимой компоненты ε'' диэлектрической проницаемости. Это свидетельствует об уменьшении удельной площади включений за счет образования агломератов нанотрубок. С дальнейшим увеличением концен-

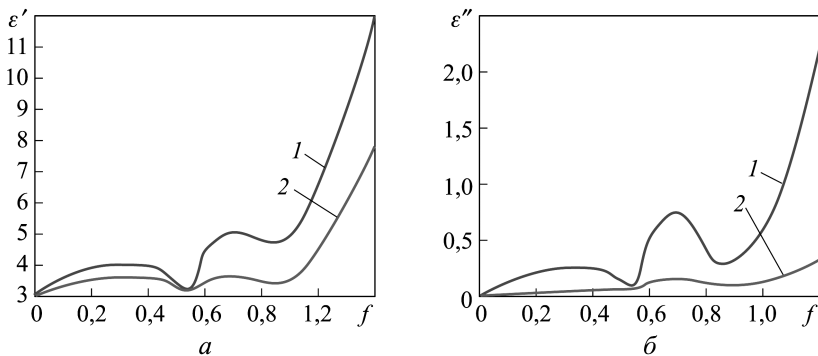


Рис. 4. Экспериментальные (1) и расчетные (2) концентрационные зависимости $\varepsilon' = \text{Re} \bar{\varepsilon}_{11}^*$ (а) и $\varepsilon'' = \text{Im} \bar{\varepsilon}_{11}^*$ (б) для полимерного композита с углеродными нанотрубками при частоте внешнего электрического поля $f = 3$ ГГц

трации наполнителя в объеме ЯП композита диэлектрические характеристики вновь монотонно возрастают. Последующее нарушение монотонности происходит при значении массовой доли нанотрубок приблизительно 0,72 масс. %.

Характер полученной концентрационной зависимости в целом соответствует экспериментальным данным для композита на основе эпоксидной смолы и углеродных нанотрубок марки СТ2Н. Расхождение числовых и экспериментальных значений характеристик эффективной диэлектрической проницаемости объясняется, по-видимому, неточными значениями диэлектрических характеристик нанотрубок при воздействии внешнего электрического поля, а также конкретной геометрической формой агломератов нанотрубок.

Был проведен расчет тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg } \delta = \varepsilon''/\varepsilon'$ полимерного композита с различными концентрациями углеродных нанотрубок при воздействии внешнего электрического поля в диапазоне частот $10^3 \dots 1,2 \cdot 10^9$ Гц. Для сравнения с ионизационными кривыми для полимерного композита с концентрацией нанотрубок $\psi_f \sim 0,75$ и 1,2 масс. % построена частотная зависимость $\text{tg } \delta$ при концентрации $\psi_f \sim 0,9$ масс. % (рис. 5). Композит с массовыми долями $\psi_f \sim 0,75$ и 1,2 масс. % имеет регулярную структуру наполнителя, с массовой долей $\psi_f \sim 0,9$ масс. % — структуру с образованиями агломератов кластеров нанотрубок.

В диапазонах частот электрического поля $10^2 \dots 10^9$ Гц реализуется немонотонная частотная зависимость диэлектрических характеристик с отчетливыми экстремумами при частотах внешнего поля около $3 \cdot 10^4$ и 10^8 Гц. Причина двукратного возрастания тангенса угла $\text{tg } \delta$ — наличие резонансной поляризации компонентов сложноструктурированного диэлектрика — эпоксидной смолы ЭД-20 и углеродных нанотрубок

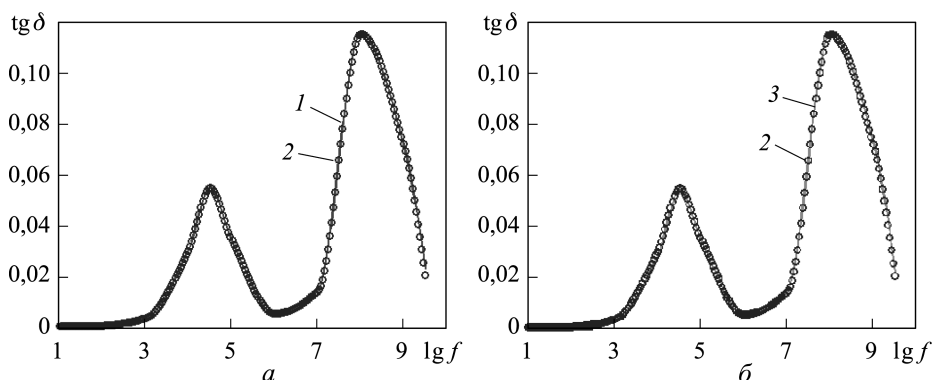


Рис. 5. Расчетные частотные зависимости тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg } \delta$ полимерного композита, модифицированного углеродными нанотрубками с концентрациями включений $\psi_f \sim 0,75$ (1), 0,9 (2) и 1,2 (3) масс. %

марки СТ2Н, при частотах внешнего электрического поля примерно 10^2 и 10^6 Гц. Частоты электрического поля $3 \cdot 10^4$ и 10^8 Гц являются собственными для указанных компонентов композита. Установлено, что в рассматриваемом диапазоне частот слипание кластерных структур нанотрубок слабо влияет на радиопоглощающие свойства композита при данных концентрациях.

Наличие максимумов зависимости тангенса угла $\text{tg } \delta$ ограничивает применение диэлектрика в определенном диапазоне значений частот электрического поля. Однако при сравнении диэлектрических характеристик смолы ЭД-20 и полимерного наноструктурированного композита в момент резонансной поляризации при частоте электрического поля около $3 \cdot 10^4$ Гц обнаружено значительное снижение диэлектрических потерь при вводе углеродных наноструктур в волокно матрицы (рис. 6). Таким образом, полимерный композит, модифицированный углеродными нанотрубками, обладает не только хорошими прочностными характеристиками, но и радиопоглощающими свойствами.

Заключение. Построена математическая модель для расчета эффективных диэлектрических характеристик сложноструктурированных композитов с помощью МАО. Сформулирована серия локальных задач на ЯП композита. Проведен расчет распределения электрического поля внутри полимерного композита, структурированного углеродными нанотрубками марки СТ2Н с применением метода конечных элементов, CSIR-схемы и метода бисопряженных градиентов. Рассчитаны компоненты эффективной комплексной диэлектрической проницаемости наноструктурированного композита с различными объемными долями включений при влиянии высокочастотного электрического поля. Предложено теоретическое обоснование влияния кластерных образований нанотрубок на немонотонный характер концентрационной зависимости диэлектрической проницаемости композита в области концентраций 0,4...1,2 масс.%. Проведен анализ частотной зависимости тангенса угла диэлектрических потерь наноструктурированного композита при воздействии электрического поля в диапазоне значений частот $10^{-6} \dots 1,2$ ГГц. Получено достаточно хорошее совпадение численных расчетов и экспериментальных данных

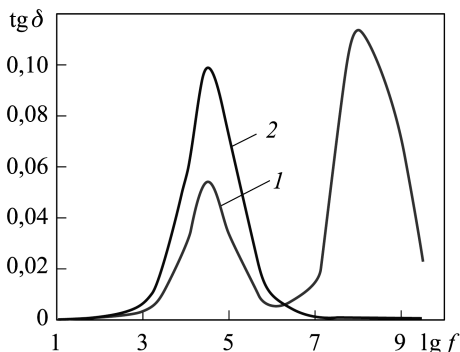


Рис. 6. Расчетные частотные зависимости тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg } \delta$ полимерного композита (1), модифицированного углеродными нанотрубками с концентрациями включений $\psi_f \sim 0,75$ масс. %, и эпоксидной смолы ЭД-20 (2)

для диэлектрических свойств полимерных композитов, модифицированных углеродными нанотрубками.

Исследования выполнены при поддержке гранта Президента РФ МК-5961.2015.8.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Гедле О.С., Лебедев С.М., Похолков Ю.П.* Частотные спектры комплексной диэлектрической проницаемости композиционных диэлектриков на основе поливинилхлорида // Известия Томского политехнического университета. 2010. Т. 310. № 1. С. 87–91.
2. *Емец Ю.П.* Эффективная диэлектрическая проницаемость трехкомпонентных композиционных материалов с анизотропной структурой // ЖТФ. 2005. Т. 75. Вып. 2. С. 67–72.
3. *Мурадян В.Е., Соколов Е.А., Бабенко С.Д., Моравский А.П.* Диэлектрические свойства композитов, модифицированных углеродными наноструктурами, в микроволновом диапазоне // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 2. 1993. С. 83–87.
4. *Kettunen H., Qi J., Wallen H., Sihvola A.* Frequency dependence of effective permittivity of simple dielectric composites // Proceedings of ACES 2010. Tampere, Finland. 2010. P. 248–253.
5. *Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П.* Осреднение процессов в периодических средах. Математические задачи механики композиционных материалов. М.: Наука, 1984. 352 с.
6. *Bensoussan A., Lions J.L., Papanicalaou G.* Asymptotic analysis for periodic structures. Amsterdam, N.Y.: North-Holland Pub. Co., 1978. 396 p.
7. *Sanchez-Palencia E.* Boundary layers and edge effects in composites // Lecture notes in Physics. 1987. No. 272. P. 121–192.
8. *Шелухин В.В., Терентьев С.А.* Гомогенизация уравнений Максвелла и дисперсия Максвелла–Вагнера // ДАН. 2009. Т. 424. № 3. С. 402–406.
9. *Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю.* Эффективная теплопроводность композита в случае отклоненной формы включений от шаровой // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 4. С. 3–17.
10. *Головин Н.Н., Кувыркин Г.Н., Зарубин В.С.* Оценка эффективных упругих характеристик материалов, модифицированных фуллереном // Композиты и наноструктуры. 2011. № 4. С. 21–31.
11. *Димитриенко Ю.И., Кашкаров А.И.* Конечно-элементный метод для вычисления эффективных характеристик пространственно-армированных композитов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2002. № 2. С. 95–108.
12. *Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В.* Асимптотическая теория конструктивно-ортотропных пластин с двухпериодической структурой // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 1. С. 36–57.
13. *Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Яковлев Д.О.* Асимптотическая теория вязкоупругости многослойных тонких композитных пластин // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2014. № 1. С. 359–382. URL: <http://technomag.bmstu.ru/doc/730105.html> DOI: 10.7463/1014.0730105
14. *Димитриенко Ю.И., Юрин Ю.В., Губарева Е.А.* Асимптотическая теория термоползучести многослойных тонких пластин // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 4. С. 36–57.
15. *Димитриенко Ю.И., Соколов А.П., Маркевич М.Н.* Моделирование диэлектрических характеристик композиционных материалов на основе метода асимптотического осреднения // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2013. № 1. С. 49–64. URL: <http://technomag.bmstu.ru/doc/531682.html> DOI: 10.7463/0113.0531682

16. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 8. М.: Наука, 1982. 621 с.
17. Димитриенко Ю.И. Универсальные законы механики и электродинамики сплошной среды / Механика сплошной среды. Т. 2. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2011. 560 с.

REFERENCES

- [1] Gefle O.S., Lebedev S.M., Pokholkov Yu.P. Complex permittivity frequency spectra of composite dielectrics on the basis of polyvinylchloride. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*, 2007, vol. 310, no. 1, pp. 82–85.
- [2] Emetch Yu.P. Effective permittivity of three-phase composite materials with an anisotropic structure. *Technical Physics*, 2005, vol. 50, iss. 2, pp. 207–212.
- [3] Muradyan V.E., Sokolov E.A., Babenko S.D., Moravskiy A.P. Microwave dielectric properties of composites modified by carbon nanostructures. *Technical Physics*, 2010, vol. 50, iss. 2, pp. 242–246.
- [4] Kettunen H., Qi J., Wallen H., Sihvola A. Frequency dependence of effective permittivity of simple dielectric composites. *Proceedings of ACES*. Tampere, Finland, 2010, pp. 248–253.
- [5] Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. [Homogenisation: Averaging Processes in Periodic Media. Mathematical Problems in the Mechanics of Composite Materials]. Springer, 1989. 352 p.
- [6] Bensoussan A., Lions J.L., Papanicalau G. Asymptotic analysis for periodic structures. Amsterdam, N.Y., North-Holland Publ. Co., 1978. 396 p.
- [7] Sanchez-Palencia E. Boundary layers and edge effects in composites. *Lecture notes in Physics*, 1987, no. 272, pp. 121–192.
- [8] Shelukhin V.V., Terent'ev S.A. Homogenization of Maxwell equations and the Maxwell–Wagner dispersion. *Doklady Earth Sciences*, 2009, vol. 424, no. 1, pp. 155–159.
- [9] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Effective thermal conductivity of a composite in case of inclusions shape deviations from spherical ones. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2014, no. 4. pp. 3–17 (in Russ.).
- [10] Golovin N.N., Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. Estimation of effective of moduli of materials modified by fullerene. *Composites and nanostructures*, 2011, no. 4, pp. 21–31.
- [11] Dimitrienko Yu.I., Kaskarov A.I. Finite-element method for calculation of effective characteristic of three-dimensional reinforced composites. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Bauman, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2002, no. 2, pp. 95–108 (in Russ.).
- [12] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Sbornichikov S.V. Asymptotic theory of constructive-orthotropic plates with two-periodic structures. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2014, no. 1, pp. 36–57 (in Russ.).
- [13] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Yakovlev D.O. Asymptotic theory of viscoelastic multilayer thin composite plates. *Nauka i obrazovanie. MGTU im. N.E. Bauman* [Science & Education of the Bauman MSTU. Electronic Journal], 2012, no. 12, pp. 359–382. DOI: 10.7463/1014.0730105
- [14] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Yurin Yu.V. Asymptotic theory of thermocreeep for multilayer thin plates. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, no. 4, 2014, pp. 36–57 (in Russ.). DOI: 10.7463/0113.0531682
- [15] Dimitrienko Yu.I., Sokolov A.P., Markevich M.N. Modeling of dielectric properties of composite materials on the basis of asymptotic averaging. *Nauka i obrazovanie. MGTU im. N.E. Bauman* [Science & Education of the Bauman MSTU. Electronic Journal], 2013, no. 1, pp. 49–64. DOI: 10.7463/0113.0531682

- [16] Landau L.D., Lifshitz E.M. Course of Theoretical Physics. Vol. 8. Electrodynamics of Continuous Media. 2nd ed. Butterworth-Heinemann, 1979. 460 p.
- [17] Dimitrienko Yu.I. Mekhanika sploshnoi sredy [Continuum mechanics]. Vol. 2. Universal'nyhe zakoni mekhaniki i elektrodinamiki sploshnikh sred [Universal continuum laws of mechanics and electrodynamics]. Moscow, MGТУ im. N.E. Baumana Publ., 2011. 560 p.

Статья поступила в редакцию 20.04.2015

Димитриенко Юрий Иванович — д-р физ.-мат. наук, профессор, директор Научно-образовательного центра “Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов” МГТУ им. Н.Э. Баумана; заведующий кафедрой “Вычислительная математика и математическая физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Dimitrienko Yu.I. — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Director of Scientific Educational Center for Supercomputer Engineering Modelling and Software Package Development, Head of Computational Mathematics and Mathematical Physics department, Bauman Moscow State Technical University. Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Губарева Елена Александровна — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Вычислительная математика и математическая физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Gubareva E.A. — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Professor of Computational Mathematics and Mathematical Physics department, Bauman Moscow State Technical University. Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Маркевич Мария Николаевна — аспирант и ассистент кафедры “Вычислительная математика и математическая физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Markevich M.N. — post-graduate student, Teaching Assistant of Computational Mathematics and Mathematical Physics department, Bauman Moscow State Technical University. Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Сборщиков Сергей Васильевич — аспирант кафедры “Вычислительная математика и математическая физика” МГТУ им. Н.Э. Баумана. МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Sborshchikov S.V. — post-graduate student of Computational Mathematics and Mathematical Physics department, Bauman Moscow State Technical University. Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Маркевич М.Н., Сборщиков С.В. Математическое моделирование диэлектрических свойств наноструктурированных композиционных материалов методом асимптотического осреднения // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. № 1. С. 76–89.
DOI: 10.18698/1812-3368-2016-1-76-89

Please cite this article in English as:

Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Markevich M.N., Sborshchikov S.V. Mathematical modelling of dielectric properties of nanostructural composites using asymptotic homogenizing method. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2016, no. 1, pp. 76–89.
DOI: 10.18698/1812-3368-2016-1-76-89