

Piotr FRĄCZAK*

TWORZENIE I OBLICZANIE MODELI ELEKTRYCZNYCH PERKOLACJI W UKŁADZIE TRÓJWYMIAROWYM

W pracy przedstawiono opis próbek walcowych polimerowych oraz budowę i obliczanie ich modeli elektrycznych perkolacji trójwymiarowych (perkolacja dla gałęzi na sieci). Modele elektryczne perkolacji trójwymiarowych próbek polimerowych stanowią obwody elektryczne. Obwody elektryczne składają się z pięciu sieci kwadratowych, usytuowanych koncentrycznie i połączonych ze sobą. Każda sieć ma gałęzie utworzone z rezystorów lub impedancji (odpowiednia kompilacja rezystorów i kondensatorów). Tak zdefiniowany model elektryczny perkolacyjny trójwymiarowy przekształcono w obwód elektryczny płaski i dostosowano do analizy w programie PSpice. W analizie obwodu elektrycznego, zgodnie z teorią perkolacji, uwzględniono losowy sposób zwierania jego gałęzi. Obliczenia symulacyjnego wartości natężenia prądu próbek polimerowych wyznaczono na podstawie ich modeli elektrycznych perkolacji trójwymiarowych, napięcia wymuszającego o określonej częstotliwości oraz zadeklarowania stosownych analiz prądowych w programie PSpice.

SŁOWA KLUCZOWE: prąd perkolacji izolatora, symulacja prąd perkolacji izolatora

1. WSTĘP

W pracy opisano wybrane struktury materii w układzie trójwymiarowym oraz przedstawiono krytyczną zawartość objętościową w układach trójwymiarowych. Ponadto zaprezentowano model elektryczny próbek polimerowych w układzie trójwymiarowym. Próbką ta składa się z pięciu sieci kwadratowych, usytuowanych koncentrycznie i połączonych ze sobą. Każda sieć ma gałęzie utworzone z rezystorów lub impedancji (odpowiednia kompilacja rezystorów i kondensatorów). Tak zdefiniowany model elektryczny perkolacyjny trójwymiarowy przekształcono w obwód elektryczny płaski i dostosowano do analizy w programie PSpice. W analizie obwodu elektrycznego, zgodnie z teorią perkolacji, uwzględniono losowy sposób zwierania jego gałęzi. Obliczenia symulacyjnego wartości natężenia prądu próbki polimerowej wyznaczono na podstawie ich modeli elektrycznych perkolacji trójwymiarowych, napięcia sieci oraz zadeklarowania stosownych analiz prądowych w programie PSpice.

* Zachodniopomorskie Centrum Edukacji Morskiej i Politechnicznej w Szczecinie.

2. WYBRANE STRUKTURY MATERII W UKŁADZIE TRÓJWYMIAROWYM

2.1. Budowa struktury polimerów

Według de Gennesa podczas formowania się łańcuchów polimerowych przy ściankach uwzględnić należy zarówno wpływ sił przyciągających, jak i odpychających [1]. Na rysunku 2.1 przedstawiono profile zagęszczenia łańcuchów polimerowych przy ściankach „przyciągających” (a) i „odpychających” (b).

W pierwszym przypadku zagęszczania łańcuchów polimerowych można wyróżnić trzy obszary:

- bliski, wrażliwy na wzajemne oddziaływania,
- środkowy (oczka o podobnej wielkości),
- daleki, określony przez kilka dużych pętli i skrajnych luźnych łańcuchów.

Zagęszczenie $\psi(z)$ w regionie środkowym przedstawić można wzorem:

$$\Psi(z) = \left(\frac{a}{z}\right)^{\frac{4}{3}} \quad (2.1)$$

gdzie: a – rozmiar jednego mera (odległość bliska), z – odległość od ścianki.

Całkowita grubość powierzchni międzyfazowej, warunkowana rozmiarem łańcuchów polimerowych, może wynosić dziesiątki nm.

W przypadku sił odpychających (rys. 2.1b) oddziaływania związane są ze wzajemną długością łańcuchów polimerowych ξ . Gdy łańcuch znajduje się blisko ścianki, entropia spada, a w obszarze sąsiadującym obecny jest prawie sam rozpuszczalnik (tzw. warstwa zubożona). W pewnych zakresach stężenia polimerów połączenie wspomnianych efektów prowadzi do powstania struktur „grzybkowych” [1].

Środkowy region warstwy polimerowej zaadsorbowanej na powierzchni „przyciągającej” może zostać przedstawiony za pomocą modelu ukazanego na rys. 2.2.

Rozmiar oczka sieci, będący malejącą funkcją stężenia polimerów, ujmuje równanie [1]:

$$\xi(z) = a[\Psi(z)]^{-\frac{3}{4}} \quad (2.2)$$

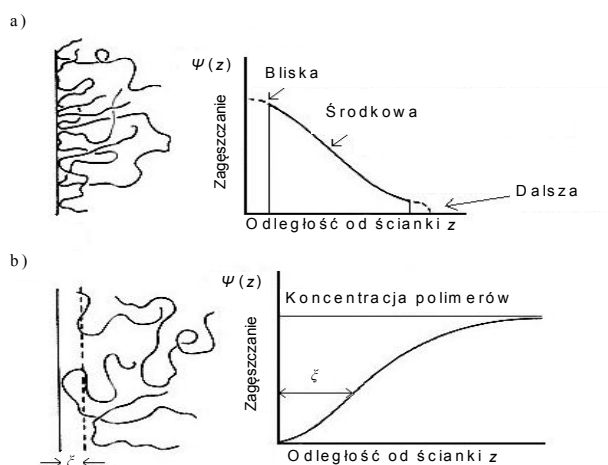
W odległości z od ścianki polimeru rozmiar oczka oblicza się w wyniku podstawienia zależności (2.1) do wzoru (2.2):

$$\xi[\Psi(z)] = a \left[\left(\frac{a}{z}\right)^{\frac{4}{3}} \right]^{-\frac{3}{4}} = a \left(\frac{a}{z}\right)^{-1} = a \frac{z}{a} = z \quad (2.3)$$

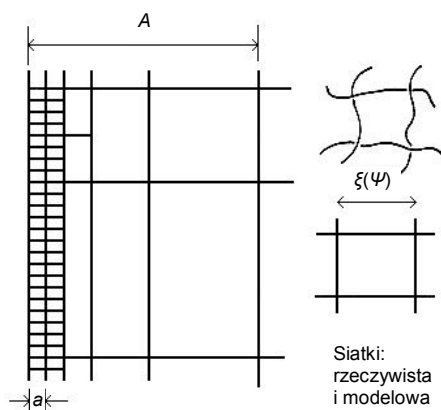
Z równania (2.3) wynika, że rozmiar oczka sieci polimerowej wzrasta w miarę zwiększania odległości z od ścianki polimeru. W odległości z od ścianki polimeru rozmiar oczka sieci wynosi z . Wykorzystując długość danego łańcucha polimerowego, który składa się z odpowiedniej liczby merów, rozmiar rzeczywistego lub modelowego oczka sieci polimerowej wyznacza się ze wzoru:

$$A = a\xi \quad (2.4)$$

gdzie: A – krotność wielkości rzeczywistego lub modelowego oczka sieci, a – rozmiar monomeru, ξ – długość łańcucha polimerowego.



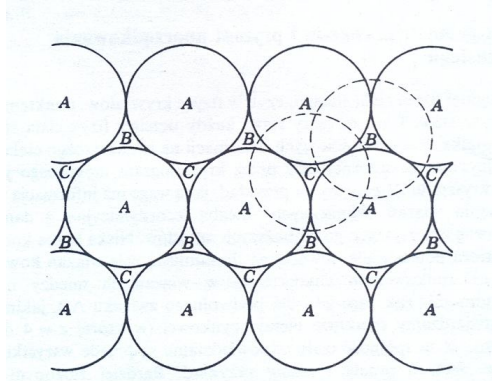
Rys. 2.1. Profile zagęszczenia łańcuchów polimerów przy ściankach warunkowane długością łańcuchów polimerowych oraz rodzajem wiązania z powierzchnią: a) „przyciągająca”; b) „odpychająca” [7]



Rys. 2.2. Sieć polimerowa na powierzchni międzyfazowej: a – wielkość monomeru w nm, ξ – rozmiar oczka [7]

2.2. Budowa krystaliczna materii

Ciasne upakowanie w trzech wymiarach (3d) może być zrealizowane w następujący sposób. Nieskończenie rozciągnięta warstwa takich samych kul, ze środkami leżącymi na jednej płaszczyźnie, jest ułożona tak, jak dla przypadku dwuwymiarowego (rys. 2.3). Następnie kolejna podobna warstwa ułożona jest na tej poprzedniej. Istnieją dwa sposoby osiągnięcia najbliższej odległości między tymi warstwami. Jeśli zaznaczone na rysunku linią ciągłą okręgi sieci A są pierwszą warstwą, to druga warstwa będzie w najbliższej odległości do pierwszej, jeśli środki należących do niej kul zajmą pozycje międzywęzłowe B lub C (międzywęzłowe dla A), pokazane na rys. 2.3. W obu przypadkach każda z kul jednej warstwy styka się z trzema kulami warstwy sąsiedniej. Gdy pierwsza warstwa tworzy sieć A, a druga sieć B, wówczas trzecia może być ułożona miejscu A lub C. Kontynuacja tej metody prowadzi do upakowania, w którym każda kula styka się dwunastoma innymi. Jest to najbardziej efektywne upakowanie w trzech wymiarach. Współczynnik upakowania w 3d, zdefiniowany jako ta część przestrzeni, która zajmowana jest przez kule, wynosi 74,0% [8].



Rys. 2.3. Krystaliczne ciasne upakowanie kul. Na warstwie A kładzie się warstw B lub C, jak pokazano na rysunku. Ułożenie warstw w kolejności ...ABCABCABC... odpowiada kubicznemu ciasnemu upakowaniu, w którym środki sfer tworzą sieć kubiczno powierzchniowo centrowaną [8]

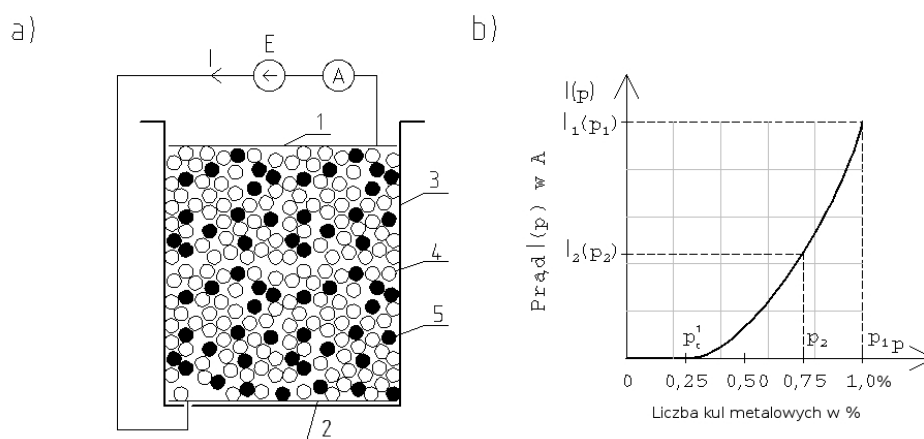
2.3. Krytyczna zawartość objętościową w układach trójwymiarowych

Krytyczną zawartość objętościową w układach trójwymiarowych można zilustrować doświadczalnie. Wyobraźmy sobie, że na dnie naczynia szklanego w kształcie zlewki umieszczono folię aluminiową (rys. 2.4), która odgrywa rolę elektrody. Następnie w szklanym naczyniu wymieszano ze sobą kulki polimerowe (izolacyjne) i metalowe (przewodzące) o tej samej średnicy, zapewniając ich przypadkowy rozkład. Tak przygotowana konfiguracja kul znajdujących się

w naczyniu zostaje przykryta elektrodą w kształcie folii aluminiowej. Wymienione elektrody podłączono do źródła prądu E . Przez p oznaczono stosunek liczby kulek metalowych do liczby wszystkich kulek w naczyniu. Dla p_1 ($p = 1$) wartość natężenia prądu $I_1(p_1)$ płynącego w obwodzie jest maksymalna. W wyniku zmniejszania zawartości kulek metalowych w obwodzie wartość natężenia prądu maleje i przy p_2 ($p = 0,75$) wynosi $I_2(p_2)$. Z kolei gdy p osiągnie wartość krytyczną dla zawartości kulek metalowych p_c^1 ($p = 0,27$), wartość natężenia prądu w obwodzie jest równa zero. Analizując przejście perkolacyjne, można rozpatrywać dwa przypadki. Pierwszy polega na odczytaniu rosnących wartości prądu perkolacyjnego (od p_c^1 do p_1), odpowiadających zwiększaniu liczby kul metalowych, a drugi na odczytaniu malejących wartości, odpowiadających zmniejszaniu liczby tych kul. Pojawienie się prądu bądź jego zanik w układzie jest związane z utworzeniem drogi perkolacji (lub klastra perkolacyjnego) łączącej obie elektrody. Próg perkolacji p_c^1 dla struktury dyskretnej w układzie trójwymiarowym oraz współczynnik wypełnienia v określają krytyczną zawartość objętościową. Jej wartość w d wymiarach dla prostej sieci j (gdy połączenia istnieją tylko między najbliższymi sąsiadami) definiuje się następującym wzorem [1, 2, 9]:

$$\phi_c^1(j, d) = v(j, d) \cdot p_c^1(j, d) \quad (2.5)$$

gdzie: $p_c^1(j, d)$ – próg perkolacyjny, $v(j, d)$ – współczynnik wypełnienia sieci równymi i stykającymi się kulami (d -wymiarowymi).



Rys. 2.4. Struktura dyskretna stanowiąca model perkolacji: a) schemat zastępczy obwodu elektrycznego: 1, 2 – elektrody, 3 – naczynie szklane, 4 – kula polimerowa, 5 – kula metalowa; b) zależność prądu $I(p)$ od liczby kul metalowych p

Środki kul stanowią węzły sieci, w związku z tym próg perkolacyjny p_c^1 dla węzłów dowolnej sieci można zastąpić wartością krytycznej zawartości objętościowej ϕ_c^1 . Ponadto stwierdzono, że wartość ϕ_c^1 nie zależy od struktury sieci w danym wymiarze d (tabela 1.1). Wartość progu perkolacyjnego p_c w przypadku wiązań dowolnej sieci można zastąpić wartością krytycznej zawartości objętościowej według wzoru:

$$\phi_c(j, d) = z(j, d) \cdot p_c(j, d) \quad (2.6)$$

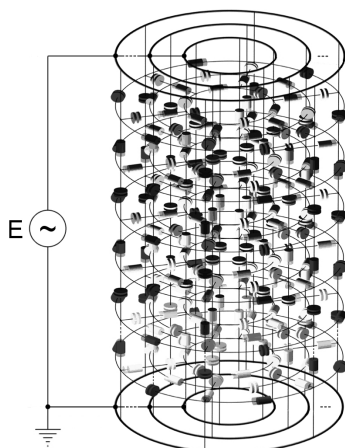
gdzie: $p_c(j, d)$ – próg perkolacyjny dla wiązań sieci, $z(j, d)$ – liczba koordynacyjna dla sieci w d wymiarach.

Na podstawie wzorów (2.5) i (2.6) stwierdzono, że wartości krytyczne zawartości objętościowej ϕ_c^1 i ϕ_c nie zależą od struktury sieci w danym wymiarze. Ponadto zauważono, że w przypadku dowolnej sieci krytyczna zawartość objętościowa dla węzłów wystąpi szybciej niż dla wiązań. Jest to sytuacja odwrotna niż w przypadku perkolacji dla wiązań p_c i węzłów p_c^1 .

3. OBLICZENIA SYMULACYJNE PRĄDU UPŁYWU PRÓBKII POLIMEROWEJ W UKŁADZIE TRÓJWYMIAROWYM

3.1 Model próbki polimerowej w układzie 3d

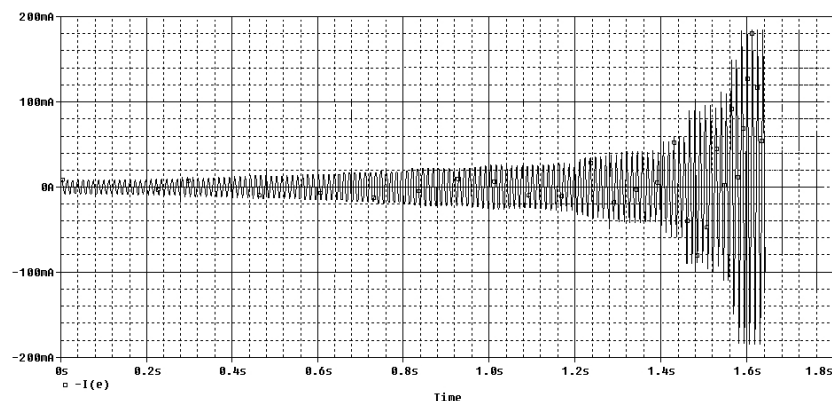
W celu przeprowadzenia obliczeń symulacyjnych prądu upływu próbki polimerowej stworzono jej model. Z kolei model elektryczny perkolacyjny próbki w 3d przekształcono w obwód elektryczny płaski i dostosowano do analizy w programie PSpice. W analizie obwodu elektrycznego, zgodnie z teorią perkolacji, uwzględniono losowy sposób zwierania jego gałęzi.



Rys. 3.1. Model próbki polimerowej w układzie 3d

Obliczenia symulacyjnego wartości natężenia prądu upływu próbki polimerowej wyznaczono na podstawie jej modelu, napięcia sieci oraz zadeklarowania stosownych analiz prądowych w programie PSpice.

3.2 Wyniki obliczeń symulacyjnych prądu upływu próbki polimerowej w układzie 3d



Rys. 3.2. Wynik obliczeń symulacyjnych prądu upływu w układzie 3d

5. WNIOSKI

W wyniku przeprowadzonych obliczeń symulacyjnych wartości natężenia prądu upływu próbki polimerowej w 3d za pomocą jej modelu elektrycznego perkolacji stwierdzono:

- Teorię perkolacji (perkolacja dla gałęzi na sieci) można zastosować do obliczeń symulacyjnych prądu upływu próbek polimerowych.
- Na otrzymanych charakterystykach symulacyjnych prądu upływu w funkcji liczby zwieranych gałęzi widać stopniowe narastanie wartości natężenia prądu upływu i nagły wzrost o kilka rzędów wielkości.
- Próg p_c^I [7]. (perkolacja dla gałęzi na sieci) w rozpatrywanym modelu perkolacji próbki odpowiada jej napięciu.

LITERATURA

- [1] Chrzan K.L.: Prąd upływu na naturalnie zabrudzonych izolatorach porcelanowych i silikonowych, Przegląd Elektrotechniczny 2008, vol. 84, nr 10, s.117–120.
- [2] Flisowski Z.: Technika wysokich napięć, wyd. 5, Warszawa, WNT 2005, ISBN 83–204–3077–1.

- [3] Frączak P.: Creation and application of electrical percolation models, Poznań University of Technology Academic Journals, Computer Applications in Electrical Engineering, Volume 12, Publishing House of Poznan University of Technology, Poznań 2014, ISSN 1508–4248, s. 92– 105.
- [4] Frączak P.: Prąd upływnościowy powierzchniowy izolatora ceramicznego podczas eksploatacji w ujęciu teorii perkolacji, Poznań University of Technology Academic Journals, Electrical Engineering Issue 78 Computer Applications in Electrical Engineering 2014, Publishing House of Poznan University of Technology, Poznań, ISSN 1897–0737, s. 149– 156.
- [5] Król A., Moczko J.: PSpice Symulacja i optymalizacja układów elektronicznych, Wydawnictwo Nakom, Poznań 1999, ISBN 83 – 86969–28–8.
- [6] Pilling J., Berndt L., Katib M., Seeling T., Der Fremdschichtueberschlag von Isolatoren mit gleichmaessinger Verschmutzung bei Wechselspannung. Wissenschaftliche Berichte, Sonderheft der Sektion Elektroenergieversorgung und Automatisierung. Technische Hochschule Zittau, Heft 23, Juli 1990, S. 38–41.
- [7] Sperling L.H.: Introdution to physical polymer science, 3th ed., New York, Wiley 2001, ISBN 0–471–32921–5.
- [8] Zallen R.: Fizyka ciał amorficznych, Warszawa, WN PWN 1994, ISBN 83–01–11265–4.

CREATING AND CALCULATION OF PERCOLATION ELECTRIC MODELS IN THE THREE–DIMENSIONAL SYSTEM

The paper presents a description of polymer cylindrical samples of polymer and the construction and calculation of their three–dimensional percolation electric models (percolation for the branch network). The three–dimensional percolation electric models of polymer samples are the electrical circuits. The electrical circuits are composed of five square networks, arranged concentrically and connected together. Each network has branches of resistors or impedance (appropriate compilation of resistors and capacitors). The defined three–dimensional percolation model electric has been transformed into flat electric circuit and then adapted to the analysis in the PSpice software. In the analysis of electric circuit, according to the percolation theory, the randomly way of closing its branches has been applied. The simulation calculations of the polymer samples current were determined based on their three–dimensional percolation electrical models, the forcing voltage of a specific frequency and declaring relevant current analyzes in PSpice software.

(Received: 09. 02. 2017, revised: 27. 02. 2017)