



www.volsu.ru

ИННОВАЦИИ В МЕТАЛЛУРГИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

DOI: <https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2019.4.5>

УДК 541.64

ББК 24.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЬЦЕОБРАЗНЫХ СТРУКТУР УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК КАК МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛУБКОВ – ВОЗМОЖНОСТЬ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ

Луиза Бремовна Аглуханова

Кандидат педагогических наук,
доцент кафедры биофизики, информатики и мед. аппаратуры,
Дагестанский государственный медицинский университет
i_dolbin@mail.ru
ул. Гусаева, 5, 367000 г. Махачкала, Российская Федерация

Георгий Владимирович Козлов

Старший научный сотрудник УНИИД,
Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова
i_dolbin@mail.ru
ул. Чернышевского, 143, 360000 г. Нальчик, Российская Федерация

Аннотация. В рамках фрактального анализа и теории перколяции исследована возможность формирования геля углеродными нанотрубками (нановолокнами), моделируемых как аналог макромолекулярных клубков, в нанокompозитах на основе полипропилена. Показано, что для достижения точки гелеобразования необходима специфическая (прямолинейная) конфигурация указанных наноуполннителей, а реализация этого эффекта может привести к резкому дискретному изменению свойств рассматриваемых нанокompозитов. Обнаружено, что эффективный модуль упругости наноуполннителей в полимерной матрице определяется не их жесткостью, а эффективностью переноса приложенного механического напряжения от полимерной матрицы к наноуполннителю.

Ключевые слова: нанокompозит, углеродные нанотрубки (нановолокна), кольцеобразные формирования, гель, модуль упругости, конфигурация, свойства.

Введение

Как хорошо известно [17; 19], углеродные нанотрубки (нановолокна) формируют в полимерном нанокompозите свернутые кольцеобразные структуры, внешне похожие на макромолекулярные клубки. Такое поведение указанных нанонаполнителей обусловлено их высокой степенью анизотропии и низкой поперечной жесткостью. В настоящее время предпринято несколько попыток использовать аналогию углеродная нанотрубка-макромолекулярный клубок для теоретических оценок [6; 17]. Очевидно, что указанная аналогия позволяет использовать хорошо разработанные методы как классической [1], так и фрактальной [13] физической химии полимерных растворов для анализа поведения углеродных нанотрубок в полимерных нанокompозитах. В этом случае кольцеобразные структуры нанотрубок рассматриваются как макромолекулярный клубок, а полимерная матрица – как растворитель [17].

Такая трактовка нанокompозитов полимер/углеродные нанотрубки делает необходимым исследование возможности реализации в них процесса гелеобразования, под которым понимается переход жидких (легкоподвижных и вязкотекучих) микрогетерогенных или гомогенных систем в твердофазное состояние геля или студня. Гелеобразование обусловлено возникновением в объеме жидкой системы пространственной фазовой или молекулярной сетки (каркаса), которая лишает систему текучести и придает ей некоторые свойства твердого тела (эластичность, пластичность, хрупкость, прочность), что представляет особый интерес при исследовании свойств полимерных нанокompозитов [5].

Целью настоящей работы является исследование свойств нанокompозитов полимер/углеродные нанотрубки (нановолокна) в рамках теории перколяции и возможности реализации в них процесса гелеобразования.

Эксперимент

В качестве матричного полимера использован полипропилен (ПП) промышленного производства «Каплен» марки 01 030. Эта марка ПП имеет показатель текучести расплава 2,3–

3,6 г/10 мин, средневесовую молекулярную массу $\sim (2-3) \times 10^5$ и индекс полидисперсности 4,5.

В качестве нанонаполнителя использованы углеродные нанотрубки (УНТ) марки «Таунит», имеющие наружный диаметр 20–70 нм, внутренний диаметр 5–10 нм и длину 2 мкм и более. В исследуемых нанокompозитах ПП/УНТ содержание таунита варьировалось в пределах 0,25–3,0 масс. %. Кроме того, использованы многослойные углеродные нановолокна (УНВ) с числом слоев 20–30 и диаметром 20–30 нм с длиной порядка 2 мкм. Содержание УНВ в нанокompозитах ПП/УНВ варьировалось в пределах 0,15–3,0 масс. %.

Нанокompозиты ПП/УНТ и ПП/УНВ получены смешиванием компонентов в расплаве на двухшнековом экструдере Thermo Haake модели Reomex RTW 25/42, производство ФРГ. Смешивание выполнено при температуре 463–503 К и скорости вращения шнека 50 об/мин в течение 5 мин. Образцы для испытаний получены методом литья под давлением на литьевой машине Test Sample Molding Apparate RR/TS MP фирмы Ray-Ran (Тайвань) при температуре 503 К и давлении 43 МПа.

Механические испытания на одноосное растяжение выполнены на образцах в форме двухсторонней лопатки с размерами согласно ГОСТ 112 62-80. Испытания проводились на универсальной испытательной машине Gotech Testing Machine CT-TCS 2000, производство ФРГ, при температуре 293 К и скорости деформации $\sim 2 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$.

Результаты и обсуждение

Авторы [6] предложили использовать для определения модуля упругости E_n нанокompозитов модифицированное правило смесей, которое в первоначальном варианте дает верхнее предельное значение модуля упругости композитов [7]:

$$E_n = E_m(1 - \varphi_n) + bE_{nan}\varphi_n, \quad (1)$$

где E_m и E_{nan} – модули упругости матричного полимера и нанонаполнителя, соответственно, φ_n – объемное содержание нанонаполнителя, $b < 1$ – коэффициент, отражающий степень реализации свойств нанонаполнителя в полимерном нанокompозите. Параметр bE_{nan} по существу представляет

собой эффективный модуль наноуплотнителя или, более точно, модуль кольцеобразных структур УНТ (УНВ) $E_{азр}^{эф}$.

Величину φ_n можно определить согласно хорошо известной формуле [15]:

$$\varphi_n = \frac{W_n}{\rho_n}, \quad (2)$$

где W_n – массовое содержание наноуплотнителя, ρ_n – его плотность, определяемая для наночастиц следующим образом [15]:

$$\rho_n = 188(D_{УНТ})^{1/3}, \text{ кг/м}^3, \quad (3)$$

где $D_{УНТ}$ – диаметр углеродных нанотрубок (нано-волокон), который дается в нм.

Оценки согласно уравнению (1) показали, что величина снижается по мере роста содержания наноуплотнителя φ_n от 51,6 до 9,9 ГПа для нанокомпозитов ПП/УНТ и от 34,9 до 5,5 ГПа для нанокомпозитов ПП/УНВ. Такое изменение $E_{азр}^{эф}$ позволяет предложить следующее соотношение для описания этого изменения:

$$E_{азр}^T \sim (\varphi_n)^{-s}, \quad (4)$$

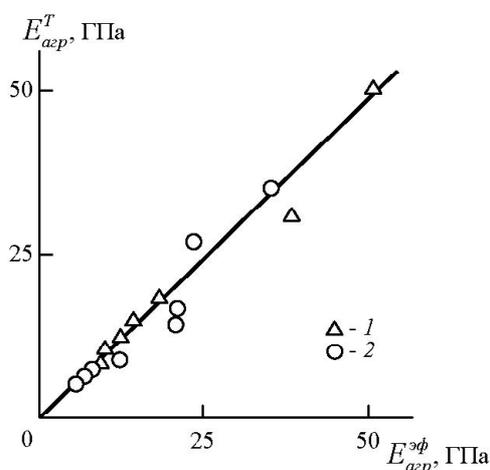
где $E_{азр}^T$ – теоретическое значение величины $E_{азр}^{эф}$, s – показатель, который был выбран равным 0,7 для нанокомпозитов ПП/УНТ и 0,6 – для нанокомпозитов ПП/УНВ.

На рисунке приведено сравнение величин $E_{азр}^{эф}$ и $E_{азр}^T$ для рассматриваемых нанокомпозитов, которое показало их достаточно хорошее соответствие (среднее расхождение $E_{азр}^{эф}$ и $E_{азр}^T$ составляет $\sim 9,5\%$). Рассмотрим физические основы применения соотношения (4) для описания модуля упругости кольцеобразных структур УНТ (УНВ). Как известно [14], для описания жесткости полимерных растворов около точки гелеобразования разработано несколько перколяционных концепций, которые дают следующее соотношение для описания их жесткости:

$$E \sim (p - p_c)^t, \quad (5)$$

где E – модуль упругости полимерного раствора, p – степень конверсии, p_c – порог перколяции, t – перколяционный индекс.

Величина t варьируется в достаточно широких пределах в случае различных теоретических и экспериментальных работ (от 1,80 до 3,88 [14]), но общей тенденцией соотношения (5) является увеличение E по мере роста p , которую в рамках предложенной аналогии следует рассматривать как объемное содержание наноуплотнителя φ_n . Это положение принципиально отличается от тенденции соотношения (4), которое показывает снижение $E_{азр}^T$ по мере роста φ_n . Последнее соотношение по своему физическому смыслу более соответствует соотношению, полученному в



Сравнение эффективных модулей упругости кольцеобразных структур УНТ (УНВ) и , рассчитанных согласно уравнениям (1) и (4), соответственно, для нанокомпозитов ПП/УНТ (1) и ПП/УНВ (2)

работе [3] для описания проводимости Σ случайной смеси двух компонентов:

$$\Sigma \sim (p - p_c)^{-s}. \quad (6)$$

Указанное сходство позволяет предположить, что соотношение (4) характеризует не собственно жесткость кольцеобразных структур УНТ (УНВ), а их способность передавать приложенное механическое напряжение. Следовательно, в рассматриваемом случае величина является $E_{асп}^{эф}$ аналогом проводимости. Сравнение соотношений (4) и (6) предполагает, что для углеродных нанотрубок (нановолокон) порог перколяции $\varphi_c = 0$. В рамках фрактального анализа точка гелеобразования или порог перколяции определяется следующим образом [8; 11]. Эффект гелеобразования, трактуемый как формирование стягивающей систему кластера, приводит к существенным изменениям параметров, описывающих эту систему, в точке гелеобразования [8]. Так, скорость перемещения кластеров (кольцеобразных структур) g с массой m предполагается равной [11]:

$$g = m^\alpha. \quad (7)$$

В точке гелеобразования показатель α изменяет знак с отрицательного на положительный. Это означает, что до точки гелеобразования большей подвижностью обладают меньшие кластеры, а за точкой гелеобразования наибольшей подвижностью будет обладать стягивающий кластер, поскольку его масса гораздо больше массы любой кольцеобразной структуры [8; 11].

Аналогичное резкое изменение показателя ω в скейлинговом соотношении Смолуховского в точке гелеобразования происходит в рамках концепции кинетического гелеобразования [8]. При $\omega < 0,5$ для всего распределения размеров кластеров справедлив общий скейлинг и средний размер кластера регулярно растет со временем, а за точкой гелеобразования ($\omega > 0,5$) этот скейлинг нарушается: наиболее быстро растет наибольший кластер [8].

Зависимость радиуса кольцеобразных структур УНТ (УНВ) $R_{УНТ}$ от продолжительности переработки t определяется следующим образом [12]:

$$R_{УНТ} \sim t^{1/z}, \quad (8)$$

где показатель z связан с фрактальной размерностью кольцеобразных структур D_f и показателем α уравнением [12]:

$$z = D_f(1 - \alpha) - (d - 2), \quad (9)$$

где d – размерность евклидова пространства, в котором рассматривается фрактал (очевидно, в нашем случае $d=3$).

Величину $R_{УНТ}$ можно рассчитать с помощью следующего перколяционного соотношения [9]:

$$\varphi_n = \frac{\pi L_{УНТ} r_{УНТ}^2}{(2R_{УНТ})^3}, \quad (10)$$

где $L_{УНТ}$ и $r_{УНТ}$ – длина и радиус углеродной нанотрубки (нановолокна), соответственно.

Как показали расчеты согласно уравнению (10), наблюдается снижение $R_{УНТ}$ по мере роста j_n и при наибольших значениях φ_n , соответствующих $W_n = 3$ масс. %, зависимости $R_{УНТ}(\varphi_n)$ имеют тенденцию выхода на асимптотическую ветвь [19], что предполагает достижение кольцеобразными структурами УНТ или УНВ своих минимальных значений $R_{УНТ}$. По аналогии с макромолекулярными клубками это означает достижение максимально плотной кольцеобразной структуры с максимальным предельным значением ее фрактальной размерности D_f (D_f^{pp}), которая определяется согласно уравнению [10]:

$$D_f^{pp} = \frac{4(d+1)}{7}. \quad (11)$$

Для $d=3$ величина $D_f^{pp} = 2,286$. Далее для оценки величины D_f можно использовать модель необратимой агрегации, которая описывает процессы полимеризации (формирования макромолекулярного клубка) и дает следующее соотношение для определения радиуса агрегата частиц $R_{асп}$ [4]:

$$R_{асп} \sim c_0^{-1/(d-D_f)}, \quad (12)$$

где c_0 – исходная концентрация агрегирующихся частиц.

Коэффициент в соотношении (12) можно определить при следующих условиях: $R_{азр} = R_{УНТ}$, $c_0 = \varphi_n$ и $D_f = D_f^{np}$. Значения $R_{УНТ}$ и φ_n приняты для $W_n = 3,0$ масс. %. Как показали оценки согласно указанному соотношению, величина D_f растет по мере увеличения φ_n (снижения $R_{УНТ}$) от 1,91 до 2,29 для нанокompозитов ПП/УНТ и от 1,76 до 2,21 для нанокompозитов ПП/УНВ.

Показатели α и ω связаны между собой следующим уравнением [8]:

$$\omega = \alpha + \frac{d-2}{D_f} \quad (13)$$

Оценки согласно уравнениям (9) и (13) показали, что условие $\alpha=0$ и $\omega=0,5$, необходимое для достижения точки гелеобразования УНТ (УНВ) реализуется только для $D_f=1,0$, то есть для полностью распрямленных нанотрубок (нановолокон) с $R_{УНТ} \rightarrow \infty$. Получение нанокompозитов полимер/углеродные нанотрубки при этих условиях может дать достаточно сильный эффект. Так, изготовление нанокompозитных волокон поливиниловый спирт/многослойные УНТ с содержанием УНТ $W_n=60$ масс. %, полученных методом «коагуляционного вытягивания нити», который предполагает практически полную ориентацию УНТ в нанокompозите ($D_f \rightarrow 1,0$), позволило получить материал с прочностью 1800 МПа, тогда как прочность аналогичных нанокompозитов, полученных традиционными методами, не превышает ~ 100 МПа [16].

И в заключение рассмотрим выбор показателя s в соотношении (4). Как показано в работе [3], аналогичный показатель в соотношении (6) можно оценить с помощью уравнения:

$$\frac{s}{v} = d_u - (d-2), \quad (14)$$

где v - критический перколяционный индекс, равный 0,88 [2], d_u - размерность неэкранированного периметра, оцениваемая согласно уравнению [3]:

$$d_u = (D_f - 1) + \frac{d - D_f}{d_w}, \quad (15)$$

где d_w - размерность случайного блуждания, принятая в дальнейшем равной 2 (броуновское движение).

Оценки согласно уравнениям (14) и (15) дали следующие значения показателя s : 0,41-0,57 для нанокompозитов ПП/УНТ и 0,34-0,53 для нанокompозитов ПП/УНВ. Как можно видеть, верхняя граница рассчитанных значений показателя s достаточно близка к величинам, выбранным в соотношении (4). Отметим, что экспериментальное доказательство возможности образования геля углеродными нанотрубками в их суспензиях дано в работе [18].

Выводы

Таким образом, результаты настоящей работы показали, что эффективный модуль упругости кольцеобразных структур УНТ (УНВ) характеризует не их жесткость, а способность передавать приложенное механическое напряжение. В отличие от полимеров, углеродные нанотрубки (нановолокна) обнаруживают эффект гелеобразования только в случае своей прямолинейной конфигурации. Достижение указанного эффекта может привести к резкому изменению свойств нанокompозитов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Будтов, В. П. Физическая химия растворов полимеров / В. П. Будтов. - СПб.: Химия, 1992. - 384 с.
2. Соколов, И. М. Размерность и другие геометрические критические показатели в теории протекания / И. М. Соколов // Успехи физических наук. - 1986. - Т. 150, № 2. - С. 221-256.
3. Стенли, Х. Фрактальные поверхности и модель «термита» для двухкомпонентных случайных материалов / Х. Стенли // Фракталы в физике. - М.: Мир, 1988. - С. 463-477.
4. Шогенов, В. Н. Фрактальные кластеры в физико-химии полимеров / В. Н. Шогенов, Г. В. Козлов. - Нальчик: Полиграфсервис и Т, 2002. - 268 с.
5. Энциклопедия полимеров / под ред. В. А. Каргина. М.: Сов. энцикл., 1972. - Т. 1. - 1223 с.
6. Эпоксидные композиты со сверхмалыми концентрациями однослойных углеродных нанотрубок / Б. А. Комаров [и др.] // Высокомолек. соед. А. - 2011. - Т. 53, № 6. - С. 897-905.
7. Ahmed, S. A Review of Particulate Reinforcement Theories for Polymer Composites / S. Ahmed, F. R. Jones // J. Mater. Sci. - 1990. - Vol. 25, № 12. - P. 4933-4942.
8. Botet, R. Gelation in Kinetic Growth Models / R. Botet, R. Jullien, M. Kolb // Phys. Rev. A. - 1984. - Vol. 30, № 4. - P. 2150-2152.

9. Bridge, B. Theoretical Modeling of the Critical Volume Fraction for Percolation Conductivity of Fibre-Loaded Conductive Polymer Composites / B. Bridge // *J. Mater. Sci. Lett.* – 1989. – Vol. 8, № 2. – P. 102–103.

10. Family, F. Fractal Dimension and Grand Universality of Critical Phenomena / F. Family // *J. Stat. Phys.* – 1984. – Vol. 36, № 5–6. – P. 881–896.

11. Kolb, M. The Sol-Gel Transition Modeled by Irreversible Aggregation of Clusters / M. Kolb, H. J. Herrmann // *J. Phys. A.* – 1985. – Vol. 18, № 8. – P. L435–L441.

12. Kolb, M. Unified Description of Static and Dynamic Scaling for Kinetic Cluster Formation / M. Kolb // *Phys. Rev. Lett.* – 1984. – Vol. 53, № 17. – P. 1653–1656.

13. Kozlov, G. V. Fractal Physical Chemistry of Polymer Solutions / G. V. Kozlov, I. V. Dolbin, G. E. Zaikov // *Polymers Research J.* – 2007. – Vol. 1, № 1–2. – P. 167–210.

14. Mechanical Properties Near Gelation Threshold, Comparison with Classical and 3d Percolation Theories / M. Adam [et al.] // *Pure Appl. Chem.* – 1981. – Vol. 53, № 5. – P. 1489–1494.

15. Mikitaev, A. K. Polymer Nanocomposites: Variety of Structural Forms and Applications / A. K. Mikitaev, G. V. Kozlov, G. E. Zaikov. – N. Y. : Nova Science Publishers, Inc., 2008. – 319 p.

16. Moniruzzaman, M. Polymer Nanocomposites Containing Carbon Nanotubes / M. Moniruzzaman, K. I. Winey // *Macromolecules.* – 2006. – Vol. 39, № 16. – P. 5194–5205.

17. Schaefer, D. W. How Nano are Nanocomposites? / D. W. Schaefer, R. S. Justice // *Macromolecules.* – 2007. – Vol. 40, № 24. – P. 8501–8517.

18. Shaffer, M. S. P. Analogies Between Polymer Solution and Carbon Nanotube Dispersions / M. S. P. Shaffer, A. H. Windle // *Macromolecules.* – 1999. – Vol. 32, № 20. – P. 6864–6866.

19. Special Features of the Structure of Carbon Nanotubes in Polymer Composite Media / Yu. G. Yanovsky [et al.] // *Nanomechanics Science and Technology. An. Intern. J.* – 2012. – Vol. 3, № 2. – P. 99–124.

REFERENCES

1. Budtov V.P. *Fizicheskaya khimiya rastvorov polimerov* [Physical Chemistry of Polymer Solutions]. Saint Petersburg, Khimiya Publ., 1992. 384 p.

2. Sokolov I.M. Razmernost i drugie geometricheskie kriticheskie pokazateli v teorii protekaniya [Dimension and Other Critical Exponents in Theory of Percolation]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 1986, vol. 150, no. 2, pp. 221–256.

3. Stanley H. Fraktalnye poverkhnosti i model «termita» dlya dvukhkomponentnykh sluchaynykh materialov [Fractal Surfaces and Model of “Termite” for Two-Component Random Materials]. Pietronero L., Tosatti E., eds. *Fraktaly v fizike* [Fractals in Physics]. Moscow, Mir, 1988, pp. 459–474.

4. Shogenov V.N., Kozlov G.V. *Fraktalnye klastery v fiziko-khimii polimerov* [Fractal Clusters in Physics-Chemistry of Polymers]. Nalchik, Poligrafservis i T Publ., 2002. 268 p.

5. Kargin V.A., ed. *Entsiklopediya polimerov* [Encyclopaedia of Polymers]. Moscow, Sovetskaya Entsiklopediya Publ., 1972, vol. 1. 1223 p.

6. Komarov B.A., Dzhavadyan E.A., Irzhak V.I., Ryabenko A.G., Lesnichaya V.A., Zvereva G.I., Krestinin A.V. Epoksiaminnye kompozity so sverkhmalymi kontsentratsiyami odnosloynnykh uglerodnykh nanotrubok [Epoxyamine Composites with Ultrasmall Concentrations of Onewalled Carbon Nanotubes]. *Vysokomolek. soed. A.* [High-Molecular Compounds, A], 2011, vol. 53, no. 6, pp. 897–905.

7. Ahmed S., Jones F.R. A Review of Particulate Reinforcement Theories for Polymer Composites. *J. Mater. Sci.*, 1990, vol. 25, no. 12, pp. 4933–4942.

8. Botet R., Jullien R., Kolb M. Gelation in Kinetic Growth Models. *Phys. Rev. A*, 1984, vol. 30, no. 4, pp. 2150–2152.

9. Bridge B. Theoretical Modeling of the Critical Volume Fraction for Percolation Conductivity of Fibre-loaded Conductive Polymer Composites. *J. Mater. Sci. Lett.*, 1989, vol. 8, no. 2, pp. 102–103.

10. Family F. Fractal Dimension and Grand Universality of Critical Phenomena. *J. Stat. Phys.*, 1984, vol. 36, no. 5–6, pp. 881–896.

11. Kolb M., Herrmann H.J. The Sol-Gel Transition Modeled by Irreversible Aggregation of Clusters. *J. Phys. A*, 1985, vol. 18, no. 8, pp. L435–L441.

12. Kolb M. Unified Description of Static and Dynamic Scaling for Kinetic Cluster Formation. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, vol. 53, no. 17, pp. 1653–1656.

13. Kozlov G.V., Dolbin I.V., Zaikov G.E. Fractal Physical Chemistry of Polymer Solutions. *Polymers Research J*, 2007, vol. 1, no. 1–2, pp. 167–210.

14. Adam M., Delsanti M., Durand D., Hild C., Munch J.P. Mechanical Properties Near Gelation Threshold, Comparison with Classical and 3d Percolation Theories. *Pure Appl. Chem.*, 1981, vol. 53, no. 5, pp. 1489–1494.

15. Mikitaev A.K., Kozlov G.V., Zaikov G.E. *Polymer Nanocomposites: Variety of Structural Forms and Applications*. New York, Nova Science Publishers, Inc., 2008. 319 p.

16. Moniruzzaman M., Winey K.I. Polymer Nanocomposites Containing Carbon Nanotubes.

Macromolecules, 2006, vol. 39, no. 16, pp. 5194-5205.

17. Schaefer D.W., Justice R.S. How Nano Are Nanocomposites? *Macromolecules*, 2007, vol. 40, no. 24, pp. 8501-8517.

18. Shaffer M.S.P., Windle A.H. Analogies Between Polymer Solution and Carbon Nanotube

Dispersions. *Macromolecules*, 1999, vol. 32, no. 20, pp. 6864-6866.

19. Yanovsky Yu.G., Kozlov G.V., Zhirikova Z.M., Aloev V.Z., Karnet Yu.N. Special Features of the Structure of Carbon Nanotubes in Polymer Composite Media. *Nanomechanics Science and Technology. An. Intern. J.*, 2012, vol. 3, no. 2, pp. 99-124.

MODELING ANNULAR STRUCTURES OF CARBON NANOTUBES AS MACROMOLECULAR COILS – A POSSIBILITY OF GEL FORMATION

Luiza B. Atlukhanova

Candidate of Sciences (Pedagogy), Associate Professor,
Department of Biophysics, Informatics and Medical Devices,
Dagestan State Medical University
i_dolbin@mail.ru
Gusaeva St., 5, 367000 Makhachkala, Russian Federation

Georgiy V. Kozlov

Senior Researcher, UNIID,
Kh. M. Berbekov Kabardino-Balkarian State University
i_dolbin@mail.ru
Chernyshevskogo St., 143, 360000 Nalchik, Russian Federation

Abstract. Carbon nanotubes (nanofibers) form folded ring-like structures in the polymer nanocomposite that look like macromolecular tangles. This behavior of these nanofillers is due to their high degree of anisotropy and low transverse stiffness. In this case, the ring-like structures of the nanotubes are considered as a macromolecular tangle, and the polymer matrix is considered as a solvent. This interpretation of nanocomposites polymer/carbon nanotubes makes it necessary to study the possibility of implementing the gelation process in them, which is understood as the transition of liquid (easily mobile and viscous) microheterogenic or homogeneous systems to the solid-phase state of gel or jelly. Gel formation is caused by the appearance of a spatial phase or molecular grid (frame) in the volume of the liquid system, which deprives the system of fluidity and gives it some properties of a solid body (elasticity, plasticity, brittleness, strength), which is of particular interest in studying the properties of polymer nanocomposites. The purpose of this work is to study the properties of polymer/carbon nanotubes (nanofibers) nanocomposites in the framework of the percolation theory and the possibility of implementing the gelation process in them. The possibility of gel formation by carbon nanotubes (nanofilaments), which are simulated as macromolecular coils, in nanocomposites based on polypropylene, is studied within the framework of the fractal analysis and the percolation theory. The paper shows that for achieving the point of gel formation the specific (straight-line) configuration of the indicated nanofillers is necessary and realization of this effect can lead to a sharp discrete change of nanocomposites in consideration. The authors find out that the effective elastic modulus of nanofillers in the polymer matrix is defined not by their stiffness, but by the efficiency of transfer of the applied mechanical stress from the polymer matrix to the nanofiller.

Key words: nanocomposite, carbon nanotubes (nanofilaments), annular formations, gel, elastic modulus, configuration, properties.