

## **Теоретические исследования полимерных нанокompозитов на основе полиэтилена, полипропилена и поливинилхлорида, армированных углеродными нанотрубками**

**И. В. Запороцкова, А. А. Крутойров, Н. П. Поликарпова**

---

Проведены теоретические квантовохимические исследования взаимодействия однослойных углеродных нанотрубок с наиболее используемыми полимерами — полиэтиленом, полипропиленом и поливинилхлоридом (ПВХ). Установлено, что адсорбция структурных единиц (мономеров) выбранных полимеров на поверхности нанотрубок приводит к образованию устойчивых комплексов “углеродная нанотрубка – полимер”, что может служить доказательством возможности создания полимерного нанокompозита на основе полимерной матрицы, армированной углеродными нанотрубками. Наличие подобного нанотубулярного “каркаса” обеспечит высокую прочность нанокompозита при сохранении его пластичности, что определяет новые области применения таких материалов. Проведенные исследования позволяют прогнозировать свойства создаваемых композиционных материалов нанокompозитов на основе полимерных матриц армированных нанотрубками.

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, полиэтилен, полипропилен, поливинилхлорид, полимерные нанокompозиты, адсорбционное взаимодействие, армирующий нанотубулярный каркас.

---

### **Введение**

В настоящее время созданию композиционных материалов на основе различных полимерных матриц армированных углеродными наноразмерными объектами уделяется особое внимание [1]. Одно из направлений исследований — разработка полимерных нанокompозитов, модифицированных и усовершенствованных за счет введения наночастиц (углеродных нанотрубок (УНТ) или тубуленов и фуллеренов [2 – 6]), которые изменяют структуру матрицы и приводят к изменению эксплуатационных и электро-физических характеристик материалов [7, 8]. Так, для композитов, наполненных УНТ, отмечалось увеличение деформации до разрушения по сравнению с исходным чистым полимером (для композитов на основе эпоксиполимеров эффект описан в работе [9], для фенилона — в [10]). Малые по количеству добавки УНТ (0,1 – 2 масс. %) увеличивают не только модуль упругости, но и разрывную прочность полимера в несколько раз [11, 12]. При этом

одновременно также увеличивается теплопроводность и электропроводность композита. В [13 – 16] УНТ использованы для модифицирования эпоксидных полимеров, что приводит к увеличению теплостойкости эпоксидных полимерных матриц, улучшению их физико-механических свойств. В [12] создан полимерный композит, состоящий из большого количества вертикально расположенных многослойных УНТ, пространство между которыми заполнено полидиметилсилоксаном. Исследования показали, что циклическая нагрузка на полимер не вызывала механической усталости, а приводила к упрочнению композита. В [17] показано, что добавка 0,25–0,50 масс. % УНТ улучшает термомеханические характеристики углепластиков на 10–20%. Влияние углеродных наполнителей, в том числе, УНТ, на свойства и структуру полимерных композитов на основе полиэтилена изучено в [18]. Показана зависимость прочностных, деформационных, электрофизических свойств композитов от количества наполнителя.

Увеличение пластичности для полимерных, модифицированных УНТ, композитов имеет общий характер, и этот эффект важен с практической и научной точки зрения, так как основным недостатком полимерных композитов вообще является постепенное уменьшение эластичности по мере увеличения содержания наполнителя. Однако до настоящего времени механизм взаимодействия полимеров с УНТ, результатом которого являются эффекты увеличения пластичности, эластичности и упрочнения нанокомпозитов, практически не изучен. Проведенные экспериментальные работы не подкреплены теоретическими исследованиями процессов взаимодействия углеродных нанотрубок с полимерными матрицами, что делает актуальными выполнение теоретических расчетов названных процессов.

Цель данной работы — теоретическое исследование механизмов взаимодействия однослойных УНТ с наиболее распространенными полимерами — полиэтиленом, полипропиленом и ПВХ.

#### Определение механизмов взаимодействия однослойных УНТ с полимерами

Несмотря на то, что в экспериментах для армирования полимерных матриц в основном используются многослойные УНТ, выбор однослойных нанотрубок для проведения теоретического моделирования процессов определен тем, что во взаимодействии нанотрубок с полимерами основную роль играет внешняя поверхность тубуленов (в том числе, и при использовании многослойных нанотрубок), которая может быть смоделирована однослойной УНТ. При этом влиянием внутренних слоев можно пренебречь. Рассмотрены особенности адсорбции структурных единиц выбранных полимеров (мономеров) на поверхности однослойных УНТ типа “arm-chair” (n, n). Возможность реализации адсорбции мономеров на поверхности нанотрубок обусловлена особенностями атомной и электронной структуры УНТ, заключающимися в наличии ненулевой кривизны поверхности, приводящей к неортогональности s- и p-связей.

Процесс адсорбции приводит к образованию устойчивых композитов на основе полимеров, армированных УНТ. Наличие подобного нанотрубчатого “каркаса” обеспечивает создание прочных и одновременно пластичных нанокомпозитных полимерных систем.

Расчеты выполнены с использованием метода функционала плотности (Density Functional Theory — DFT) с функционалом B3LYP [19].

#### Механизм адсорбции мономера полиэтилена на поверхности однослойной УНТ

Исследована возможность присоединения мономера этилена  $\text{CH}_2 = \text{CH}_2$  к внешней поверхности однослойной УНТ типа (6, 6). В качестве геометрической модели тубулена выбран молекулярный кластер (МК), содержащий 6 шестиатомных циклов по периметру трубки и 4 элементарных слоя вдоль ее оси. Оборванные связи на границе кластера замыкались псевдоатомами, в качестве которых выбраны атомы водорода. На рис. 1 представлена модель взаимодействия тубулена (6, 6) и мономера этилена. Взаимодействие может осуществляться через один из возможных адсорбционных центров мономера: через адсорбционный центр Н (атом водорода) этилена с образованием связи С – Н; через адсорбционный центр С (атом углерода) этилена с образованием связи С – С. Для исключения влияния краевых эффектов положение адсорбирующегося мономера выбрано примерно в середине кластера нанотрубки.

Процесс адсорбции моделировали пошаговым приближением молекулы мономера к выбранному атому поверхности УНТ с шагом 0,01 Å. Оптимизацию геометрии полученной системы проводили на каждом шаге. В результате расчетов были построены нормированные профили поверхности потенциальной энергии процесса адсорбции (рис. 2).

При анализе результатов оптимизации геометрии адсорбционного комплекса обнаружено, что цилиндрическая симметрия трубки нарушается за счет удлинения связей С – С углеродного гексагона, на атом которого адсорбируется этилен. Удлинение составляет в среднем 5 % от первоначальной длины связи С – С, равной 1,4 Å. Значения энергий взаимодействий  $E_{\text{ад}}$  вычислены как разность полных энергий невзаимодействующих моделей адсорбента и адсорбата (УНТ и мономер этилена) —  $E_{\text{уб}} + E_{\text{эТ}}$ , соответственно, и их адсорбционного комплекса  $E_{\text{ад.к}}$ :

$$E_{\text{ад}} = E_{\text{ад.к}} - (E_{\text{уб}} + E_{\text{эТ}}).$$

Адсорбция реализуется для обоих вариантов взаимодействия, что подтверждается наличием минимума на энергетических кривых (рис. 2). Причем реализуется химическое взаимодействие на достаточно малых расстояниях (1,57 и 1,43 Å). Основные параметры для двух вариантов адсорбционного взаимодействия представлены в табл. 1.

Анализ результатов показал, что для обоих вариантов взаимодействия адсорбция мономера на поверхности однослойной УНТ возможна. При этом энергетически более выгодным является взаимо-

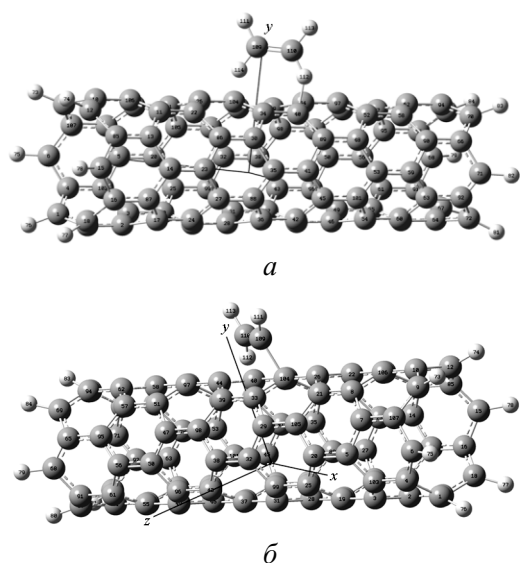


Рис. 1. Модель взаимодействия мономера этилена и УНТ (6, 6): *a* — через адсорбционный центр Н этилена с образованием связи С – Н; *b* — через адсорбционный центр С этилена с образованием связи С – С.

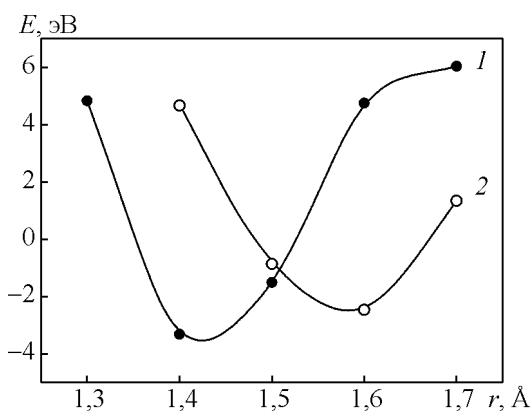


Рис. 2. Энергетические кривые процесса присоединения мономера этилена к внешней поверхности УНТ (6, 6): *1* — через адсорбционный центр Н этилена с образованием связи С – Н; *2* — через адсорбционный центр С этилена с образованием связи С – С.

Таблица 1

Основные параметры адсорбционного взаимодействия мономера этилена и УНТ (6, 6) для вариантов образования связей С – С и С – Н

Вариант образования связи	Расстояние адсорбции, $r_{ад}$ , Å	Энергия адсорбции, $E_{ад}$ , эВ
С – С	1,57	-2,9
С – Н	1,43	-3,8

действие через адсорбционный центр — атом водорода мономера — с образованием связи С – Н (энергия адсорбции в этом случае больше, чем для случая взаимодействия через атом углерода). Реализуется химическое взаимодействие на достаточно малом расстоянии, что обеспечивает прочную связь УНТ и структурной единицы полиэтилена. Это позволяет сделать вывод, что УНТ могут образовывать так называемый армировочный каркас полимерной матрицы полиэтилена, что и обеспечивает прочность получаемого полимерного наноккомпозита.

### Механизм адсорбции мономера полипропилена на поверхности однослойной УНТ

Исследована возможность присоединения мономера полипропилена  $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_3$  к внешней поверхности однослойной УНТ типа (6, 6). Модель взаимодействия была аналогична описанной ранее для взаимодействия УНТ и мономера этилена. Рассмотрено взаимодействие через один из адсорбционных центров молекулы пропилена: через адсорбционный центр Н (атом водорода) пропилена с образованием связи С – Н, через адсорбционный центр С (атом углерода) пропилена с образованием связи С – С (рис. 3).

В результате пошаговых расчетов были построены нормированные профили поверхности потенциальной энергии процесса адсорбции мономера пропилена на поверхности нанотрубки для двух вариантов взаимодействия (рис. 4). Наличие минимумов на кривых свидетельствует о реализации адсорбционного взаимодействия, причем энергетически более выгоден вариант взаимодействия через центр — атом водорода пропилена. Энергетическая кривая для варианта взаимодействия пропилена через адсорбционный центр — атом углерода пропилена (рис. 4б) имеет два минимума: на расстояниях  $r_{ад1} = 1,88 \text{ Å}$  и  $r_{ад2} = 1,52 \text{ Å}$ , что соответствует энергиям адсорбции равным  $-1,2 \text{ эВ}$  и  $-5,8 \text{ эВ}$ , соответственно. Для того чтобы попасть во второй минимум на расстоянии  $1,52 \text{ Å}$ , необходимо преодолеть небольшой потенциальный барьер высотой  $2,8 \text{ эВ}$ . Второй минимум более выгоден с энергетической точки зрения, поэтому такое состояние адсорбционного комплекса более стабильно по сравнению с состоянием системы в первом минимуме. Реализуется химическое взаимодействие, что обеспечивает прочную связь между поверхностью нанотрубки и структурной единицей полипропилена. Это позволяет утверждать, что УНТ могут образовывать армировочный каркас полимерной матрицы полипро-

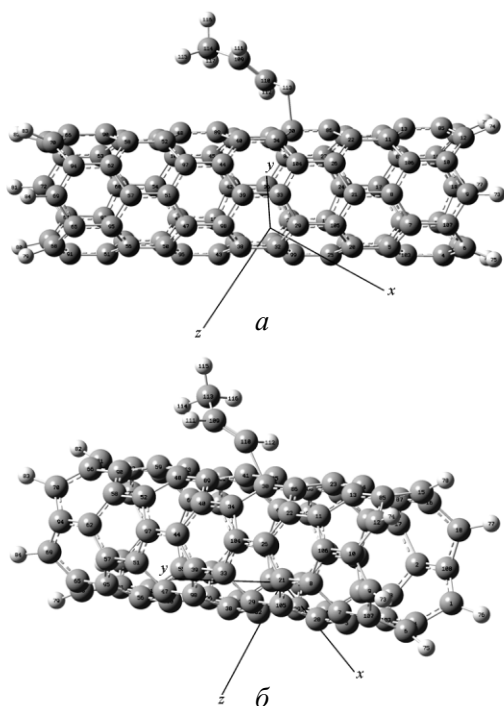


Рис. 3. Модель взаимодействия мономера пропилена и УНТ (6, 6): *a* – через адсорбционный центр Н с образованием связи С – Н; *б* – через адсорбционный центр С с образованием связи С – С.

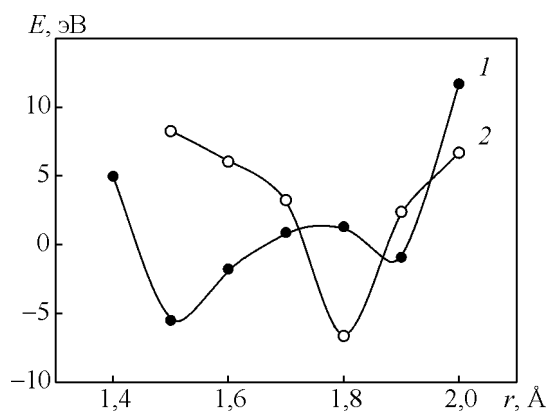


Рис. 4. Энергетические кривые процесса присоединения мономера пропилена к внешней поверхности нанотрубки: 1 – через адсорбционный центр Н пропилена с образованием связи С – С, 2 – через адсорбционный центр С этилена с образованием связи С – Н.

Таблица 2

Основные параметры адсорбционного взаимодействия мономера пропилена и углеродной нанотрубки (6, 6) для вариантов с образованием связей С – С и С – Н

Вариант образования связи	Расстояние адсорбции, Å		Энергия адсорбции, эВ	
	$r_{ад1}$	$r_{ад2}$	$E_{ад1}$	$E_{ад2}$
С – С	1,88	1,52	-1,20	-5,03
С – Н	1,8	—	-6,64	—

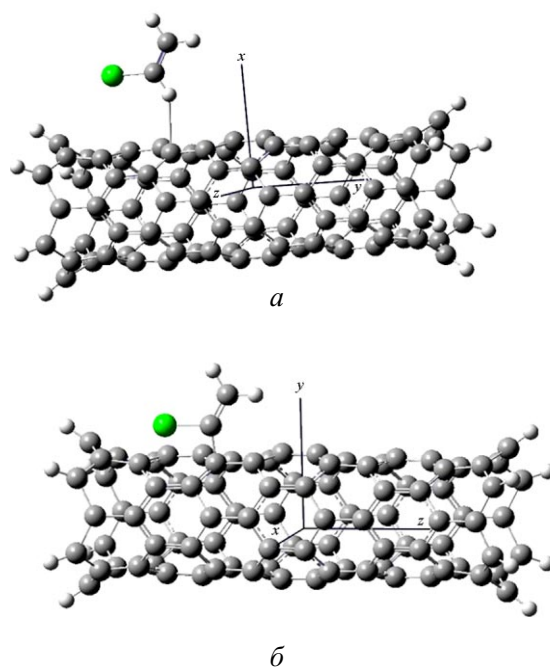


Рис. 5. Модель взаимодействия мономера ПВХ и УНТ (6, 6): *a* – через адсорбционный центр Н винилхлорида с образованием связи С – Н; *б* – через адсорбционный центр С винилхлорида с образованием связи С – С.

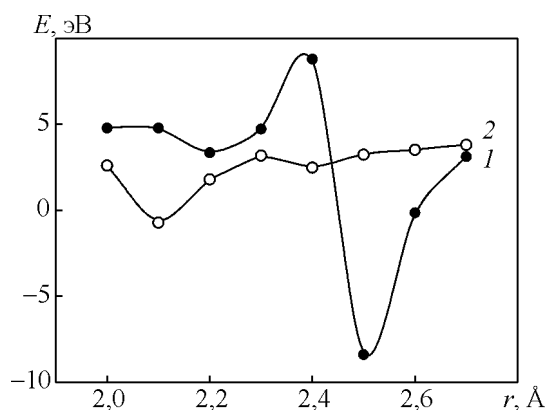


Рис. 6. Энергетические кривые процесса присоединения мономера ПВХ к внешней поверхности нанотрубки: 1 – через адсорбционный центр Н мономера с образованием связи С – Н, 2 – через адсорбционный центр С мономера с образованием связи С – С.

Таблица 3

Основные параметры адсорбционного взаимодействия мономера винилхлорида и УНТ (6, 6) для вариантов с образованием связей С – С и С – Н

Вариант образования связи	Расстояние адсорбции, $r_{ад}$ , Å	Энергия адсорбции, $E_{ад}$ , эВ
С – С	2,1	-0,8
С – Н	2,52	-8,46

пилена, обеспечивая прочность и пластичность получаемого нанокомпозита. Основные параметры процесса адсорбции приведены в табл. 2.

### **Механизм адсорбции мономера ПВХ на поверхности однослойной УНТ**

Исследована возможность присоединения мономера ПВХ –  $\text{CH}_2 - \text{CH} - \text{Cl}$  – к внешней поверхности однослойной УНТ типа (6, 6). Как и в предыдущих случаях, в качестве геометрической модели тубулена выбраны молекулярные кластеры, содержащие 6 углеродных гексагонов по периметру трубки и 4 элементарных слоя вдоль ее оси. Границы кластеров замыкались псевдоатомами водорода. Взаимодействие возможно через один из адсорбционных центров мономера ПВХ: атом водорода мономера и атом углерода мономера. Для исключения влияния краевых эффектов положение адсорбирующегося мономера выбрано в середине кластера нанотрубки.

Процесс адсорбции моделировали пошаговым приближением мономера ПВХ к поверхности УНТ с шагом 0,01 Å при полной оптимизации геометрической структуры взаимодействующих систем. В результате расчетов построены энергетические кривые процесса взаимодействия (рис. 5). Наличие минимумов на кривых свидетельствует о реализации адсорбционного взаимодействия, причем энергетически более выгоден вариант взаимодействия через адсорбционный центр — атом водорода ПВХ. Однако в отличие от рассмотренных ранее случаев взаимодействия УНТ с мономерами полиэтилена и полипропилена для мономера ПВХ реализуется физическая адсорбция на достаточно большом расстоянии. Это свидетельствует о более слабом взаимодействии УНТ с матрицей ПВХ. В данном случае по-прежнему наиболее активным центром мономера является атом водорода. Основные параметры процесса адсорбции приведены в табл. 3.

Основной вклад в валентную зону для всех рассмотренных взаимодействий полученных композитных полимерных систем дают s- и p-орбитали атомов углерода и s-орбитали атома водорода мономеров выбранных полимеров. Для композита с мономером ПВХ s- и p-орбитали атома хлора также дают вклад в валентную зону. Зона проводимости во всех случаях выполнена 2p-атомными орбиталями углерода нанотрубки.

### **Заключение**

Предложен механизм взаимодействия полимеров с УНТ, результатом которого являются

эффекты увеличения пластичности, эластичности и упрочнения полимерных нанокомпозитов, заключающийся в реализации адсорбции полимеров на внешней поверхности УНТ. Возможность и эффективность адсорбции полимерных фрагментов обеспечена большой кривизной поверхности нанотрубок, делающей их уникальными сорбентами. В результате такого адсорбционного взаимодействия в полимерной матрице образуется армировочный каркас, выполненный УНТ, которые, обладая уникальными механическими характеристиками, обеспечивают прочность получаемого полимерного композита при сохранении его пластичности.

Выполненные исследования взаимодействий УНТ малого диаметра с мономерами наиболее распространенных полимеров полиэтилена, полипропилена и поливинилхлорида доказали, что для двух предложенных вариантов взаимодействия с использованием активных центров мономеров (атомов водорода и глерод) адсорбция возможна. При этом энергетически более выгодным для всех выбранных полимеров будет взаимодействие с УНТ через адсорбционный центр — атом водорода с образованием связи С – Н. Для взаимодействий УНТ с мономерами полиэтилена и полипропилена реализуется химическое взаимодействие, обеспечивающее прочную связь нанотрубки и полимерной матрицы, в отличие от комплекса “УНТ – ПВХ”, для которого установлено возникновение более слабой (с энергетической точки зрения) физической адсорбции.

Проведенные теоретические расчеты и сделанные выводы о возможности образования устойчивых композитов на основе полимеров, армированных УНТ, полностью согласуются с результатами экспериментальных работ по модифицированию полимеров нанотрубками и вносят свой вклад в объяснение эффектов модифицирования за счет создания армировочного нанотрубного каркаса в полимерной матрице, который и обеспечивает создание прочных и одновременно пластичных нанокомпозитных полимерных систем. Полученные результаты полезны при разработке методов получения композиционных полимерных наноматериалов, обладающих высокими эксплуатационными свойствами.

### **Литература**

1. Каблов Е.Н., Кондрашов С.В., Юрков Г.Ю. Перспективы использования углеродсодержащих наночастиц в связующих для полимерных композиционных материалов. Российские нанотехнологии, 2013, т. 8, № 3 – 4, с. 24 – 42.

2. Saito R., Dresselhaus M.S., Dresselhaus G. Physical properties of carbon nanotube. London UK: Imperial College Press., 1999, 251 p.
3. Harris P. J. F. Carbon nanotubes and related structures. New Materials for the Twenty-first Century. New York USA: Cambridge University Press., 1999, 336 p.
4. Запороцкова И.В. Углеродные и неуглеродные наноматериалы и композитные структуры на их основе: строение и электронные свойства. Волгоград: Изд-во Волгоградского государственного университета, 2009, 456 с.
5. Dresselhaus M., Dresselhaus G., Avouris P. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and application. Berlin Germany: Springer-Verlag., 2000, 464 p.
6. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение углеродных нанотрубок. М.: Изд-во БИНОМ, 2014, 488 с.
7. Wang C., Guo Z.-X., Fu S., Wu W., Zhu D. Polymers containing fullerene or carbon nanotube structures. Prog.Polym.Sci., 2004, v. 29, p. 1079 – 1141.
8. Джатиева Р.Д., Беляева Т.Н., Ткачев А.Г. Полимерные композиции, содержащие углеродный наноструктурный материал. Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технологий, 2013, т. 56, № 5, с. 122 – 123.
9. Khabashesku V.N., Barrera E.V., Lobo R.F.M. Confined tubular carbon nanostructures for nanoreactors and synths. Current Research on Nanotechnology, 2007, v. 1, no. 2, p. 165 – 182.
10. Яновский Ю.Г., Козлов Г.В., Буря А.И., Липатов Ю.С. Тепловое расширение полимерных композитов, наполненных углеродными нанотрубками. Физическая мезомеханика, 2007, т. 10, № 6, с. 63 – 67.
11. Coleman J.N., Khan U., Blau W.J., Gun'ko Y.K. Small but strong: A review of the mechanical properties of carbon nanotube–polymer composites. Carbon, 2006, v. 44, no. 9, p. 1624 – 1652.
12. Brent C.J., Prabir P.K., Glauro S.G., Pulickel A.M. Observation of dynamic strain hardening in polymer nanocomposites. ACS Nano, 2011, v. 5, no. 4, p. 2715 – 2722.
13. Кондрашов С.В., Дьячкова Т.П., Богатов В.А., Мансурова И.А., Мараховский П.С., Мокрецова И.А., Фокин А.С. Использование углеродных нанотрубок для увеличения теплостойкости эпоксидных связующих. Перспективные материалы, 2013, № 2, с. 17 – 23.
14. Богатов В.А., Кондрашов С.В., Мансурова И.А., Минаков В.Т. Исследование механизма влияния углеродных нанотрубок на физико-механические свойства нанокомпозитов. Авиационные материалы и технологии, 2012, № 5, с. 353 – 359.
15. Кондрашов С.В., Грачев В.П., Акатенков Р.В., Алексахин В.Н., Деев И.С., Аношин И.В., Раков Э.Г., Иржак В.И. Модифицирование эпоксидных полимеров малыми добавками многослойных углеродных нанотрубок. Высокомолекулярные соединения. 2014, т. 56, № 3, с. 316 – 321.
16. Кондрашов С.В., Мараховский П.С., Майорова И.А., Егоров А.А., Мансурова И.А., Юрков Г.Ю. Влияние

режима отверждения на формирование структуры эпоксикомпозитов в присутствии углеродных нанотрубок. Перспективные материалы, 2014, № 6, с. 56 – 63.

17. Окотруб А.В., Юданов Н.Ф., Алексахин В.М., Булушева Л.Г., Комарова О.А., Костас У.О., Гевко П.Н., Антюфеева Н.В., Ильченко С.И., Гуляев Г.М. Исследование термических и механических свойств композитов из электродуговых углеродных нанотрубок и термостойкого связующего на основе цианового эфира. Высокомолекулярные соединения. 2007, Сер. А, т. 49, № 6, с. 1049 – 1055.
18. Петрова Г.Н., Журавлева П.Л., Исходжанова И.В., Бейдер Э.Я. Влияние углеродных наполнителей на свойства и структуру полимерных композитов на основе полиэтилена. Российские нанотехнологии, 2014, т. 9, № 5 – 6, с. 78 – 83.
19. Koch W., Holthausen M. A chemist's guide to density functional theory, Weinheim: Wiley-VCH. 2002, p. 19 – 28.

## References

1. Kablov E.N. Kondrashov S.V., Yurkov G.Y. Perspektivi ispolzovania uglerodosoderzhaschih nanochastits v svyuzujuschih dlya ppolimernih kompozitsionnih materialov [Prospects for the use of carbonaceous nanoparticles in binders for polymer composites]. Rossijskie nanotehnologii — Russian nanotechnology, 2013, vol. 8, no. 3 – 4, pp. 24 – 42.
2. Saito R., Dresselhaus M.S., Dresselhaus G. Physical properties of carbon nanotube, Imperial College Press. London UK, 1999, 251 p.
3. Harris P. J. F. Carbon nanotubes and related structures. New Materials for the Twenty-first Century, Cambridge University Press. New York USA, 1999, 336 p.
4. Zaporotskova I.V. Uglerodnie i neuglerodnie nanomateriali i kompozitnie structuri na ih osnove: stroenie i electronnie svoistva. Carbon and non-carbon nanomaterials and composite structures based on them : the structure and electronic properties. Volgograd, Russia, Volgograd State Univ. Publ., 2009, 456 p.
5. Dresselhaus M., Dresselhaus G., Avouris P. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and application. Berlin Germany, Springer-Verlag. 2000, 464 p.
6. Djyachkov P.N. Elektronnie svoistva i primeneniye uglerodnih nanotrubok [Electronic properties and applications of carbon nanotubes], Moscow, BINOM Publ., 2014, 488 с.
7. Wang C., Guo Z.-X., Fu S., Wu W., Zhu D. Polymers containing fullerene or carbon nanotube structures. Prog.Polym.Sci., 2004, vol. 29, pp. 1079 – 1141.
8. Djatieva R.D., Belyaevs T.N., Tkachev A.G. Polimerne kompozitsii, soderzhaschie uglerodnii nanostrukturinii material [Polymeric compositions containing the carbon nanostructured material]. Izvestiya vischih utshebnih zavedenii. Seriya: Himiya i himicheskaya tehnologiya — Proceedings of the higher educational institutions. Series:

- Chemistry and chemical technology*, 2013, vol. 56, no. 5, pp. 122 – 123.
9. Khabashesku V.N., Barrera E.V., Lobo R.F.M. Confined tubular carbon nanostructures for nanoreactors and synths. *Current research on nanotechnology*, 2007, vol. 1, no. 2, pp. 165 – 182.
  10. Yanovskii Y.G., Kozlov G.V., Burya A.I., Lipatov Y.S. Teplovoe rasshirenie polimernykh kompozitov, napolnennykh uglerodnymi nanotrubkami [Thermal expansion of polymer composites filled with carbon nanotubes], *Fizicheskaya mezomehanika — Physical mesomechanics*, 2007, vol. 10, no. 6, pp. 63 – 67.
  11. Coleman J.N., Khan U., Blau W.J., Gun'ko Y.K. Small but strong: A review of the mechanical properties of carbon nanotube-polymer composites. *Carbon*, 2006, vol. 44, no. 9, pp. 1624 – 1652.
  12. Brent Carey J., PrabirPatra K., Glauro Silva G., PulickelAjayan M. Observation of dynamic strain hardening in polymer nanocomposites. *ACS Nano*, 2011, vol. 5, iss. 4, pp. 2715 – 2722.
  13. Kondrashov S.V., Djachkova T.P., Bogatov V.A., Mansurova I.A., Marahovskii P.S., Mokratsova I.A., Fokin A.S. Ispolzovanie uglerodnih nanotrubok dlya uvlechenia teplostoikosti epoksidnih svyazujschih [The use of carbon nanotubes to increase the heat resistance of epoxy resins], *Perspektivnie materialy — Advanced materials (in Rus)*, 2013, no. 2, pp. 17 – 23.
  14. Bogatov V.A., Kondrashov S.V., Mansurova I.A., Minakov V.T., Issledovanie mehanizma vliyania uglerodnih nanotrubok na fiziko-mehaniicheskie svoystva nanokompozitov. [Investigation of the mechanism of the effect of carbon nanotubes on the mechanical properties of nanocomposites], *Aviatsionnie materialy i tehnologii — Aviation materials and technology*, 2012, no. 5, pp. 353 – 359.
  15. Kondrashov S.V., Grachev V.P., Akatenkov R.V., Aleksashin V.N., Deev I.S., Anoshin I.V., Rakov E.G., Irjak V.I. Modofotsirovanie epoksidnih polimerov malimi dobavkami mnogoslainih uglerodnih nanotrubok [Modification of epoxy polymers, small additions of multi-walled carbon nanotubes], *Vysokomolekulyarnye soedineniya — Macromolecular compounds*, 2014, vol. 56, no. 3, pp. 316 – 321.
  16. Kondrashov S.V., Marahovskii P.S., Majorova I.A., Egorov A.A., Mansurova I.A., Yurkov G.Y. Vliyanie rejima otverjdenia na formirovanie strukturi epoksidkompozitov v prosutstvii uglerodnih nanotrubok [Influence of curing regime on structure of epoxy-composites in presence of carbon nanotubes], *Perspektivnie materialy — Advanced materials (in Rus)*, 2014, no. 6, pp. 56 – 63.
  17. Okotrub A.V., Yudanov N.F., Aleksachin V.M., Bulusheva L.G., Komarova O.A., Kostas U.O., Gevko P.N., Antyufeeva N.V., Ilchenko S.I., Gunyaev G.M. Issledovanie termicheskih i mehanicheskih svoystv kompozitov iz elektrodugovih uglerodnih nanotrub i termostoikogo svyazuyuschego na osnove tsianovogo efira [Investigation of the thermal and mechanical properties of composites of carbon nanotubes electric and heat-resistant binder based cyan ether], *Vysokomolekulyarnye soedineniya — Macromolecular compounds A*, 2007, vol. 49, no. 6, pp. 1049 – 1055.
  18. Petrova G.N., Juravleva P.L., Ishodganova I.V., Bejder E.Y., Vliyanie uglerodnih napolnitelei na svoystva i strukturu polimernih kompozitov na osnove polietilena [Effect of carbon fillers on properties and structure of polymeric composites based on polyethylene], *Rossiiskie nanotehnologii — Russian nanotechnology*, 2014, vol. 9, no. 5 – 6, pp. 78 – 83.
  19. Koch W., Holthausen M. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Weinheim: Wiley-VCH. 2002, pp. 19 – 28.

*Статья поступила в редакцию 7.05.2014 г.*

**Запороцкова Ирина Владимировна** — Волгоградский государственный университет (400062, г. Волгоград, пр. Университетский 100), доктор физико-математических наук, профессор, специалист в области наноматериаловедения. E-mail: irinazaporotskova@gmail.com.

**Крутойров Алексей Андреевич** — Волгоградский государственный университет (400062, г. Волгоград, пр. Университетский 100), специалист в области наноматериаловедения. E-mail: akrutoyarov@yandex.ru.

**Поликарпова Наталья Павловна** — Волгоградский государственный университет (400062, г. Волгоград, пр. Университетский 100), кандидат физико-математических наук, специалист в области наноматериаловедения. E-mail: n.z.1103@mail.ru.

## **Theoretical studies of polymer nanocomposites based on polyethylene, polypropylene and PVC, reinforced with carbon nanotubes**

**I. V. Zaporotskova, A. A. Krutoyarov, N. P. Polikarpova**

The results of theoretical quantum-chemical studies of the interaction of single-walled carbon nanotubes with the most used polymers – polyethylene, polypropylene and polyvinyl chloride. Found that the adsorption of structural units (monomers) selected polymers on the surface of nanotubes leads to the formation of stable complexes “CNT – polymer” that can serve as an evidence of the possibility of creating a nanocomposite based on a polymer of the polymer matrix reinforced with carbon nanotubes. The presence of such a nanotube “framework” will provide high strength nanocomposite while retaining its plasticity, which defines new applications of such materials. The studies allow to predict the properties of composite materials produced nanocomposites based on polymer matrices reinforced with carbon nanotubes.

**Keywords:** carbon nanotubes, polyethylene, polypropylene, polyvinyl chloride, polymer nanocomposites, adsorptive interactions, nanotubular reinforcing frame.

---

***Zaporotskova Irina** – Volgograd State University (400062, Russia, Volgograd, Universitetskii pr. 100), DrSci (Phys-math), professor, specialist in nanomaterials. E-mail: irinazaporotskova@gmail.com.*

***Krutoyarov Alexey** — Volgograd State University (400062, Russia, Volgograd, Universitetskii pr. 100), specialist in nanomaterials. E-mail: irinazaporotskova@gmail.com.*

***Polikarpova Natalia** — Volgograd State University (400062, Russia, Volgograd, Universitetskii pr. 100), PhD (Phys-math), specialist in nanomaterials. E-mail: n.z.1103@mail.com.*