

Механизм создания композита на основе полипропилена, модифицированного углеродными нанотрубками разной слойности

© 2025 г. Л. С. Элбакян✉, И. В. Запороцкова

*Волгоградский государственный университет,
Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация*

✉ Автор для переписки: lusniak-e@yandex.ru

Аннотация. Проводящие полимеры представляют собой интересный и многообещающий класс материалов с уникальными свойствами. Они обладают хорошей электропроводностью, что делает их подходящим материалом для применения в электронике. Проводящие полимеры используются в производстве органических светодиодов, солнечных элементов, транзисторов и сенсоров. Благодаря своей чувствительности к изменениям окружающей среды проводящие полимеры могут применяться в различных сенсорах, включая газовые и биосенсоры. Проводящие полимеры используются для создания антистатических покрытий, что особенно важно в электронике и производстве, в батареях, суперконденсаторах и других электрохимических системах. Благодаря своей легкости и гибкости проводящие полимеры открывают новые возможности для разработки гибкой и носимой электроники.

В настоящее время достаточно распространены исследования по созданию новых полимерных материалов, которые получают путем модифицирования известных полимеров различными наполнителями, в том числе наноматериалами. Одним из наиболее известных наноматериалов являются углеродные нанотрубки. Существующие области применения нанотрубок практически безграничны.

В данной работе в качестве основных исследуемых объектов выбран известный полимер полипропилен и углеродные нанотрубки. Включение проводящих наполнителей в полипропилен позволит использовать созданный материал для многих передовых технологий в электронике. В работе исследованы процессы взаимодействия одно- и двуслойных углеродных нанотрубок с мономером полипропилена, а также с его протяженным фрагментом. Особенности структуры, электронно-энергетическое строение нанокомпозита на основе полипропилена, допированного углеродными нанотрубками, а также изучение механизмов взаимодействия между углеродными нанотрубками и фрагментами полипропилена исследованы с применением теории функционала плотности. Выполнен анализ электронно-энергетического строения комплексов, образованных одно- и двуслойными углеродными нанотрубками и фрагментом полипропилена. Установлено, что полученный композиционный материал на основе полипропилена будет обладать проводящими свойствами.

Ключевые слова: полипропилен, одно- и двуслойные углеродные нанотрубки, полимерные нанокомпозиты, электрические и сорбционные свойства

Благодарности: Исследование проводилось в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «FZUU-2023-0001»).

Для цитирования: Элбакян Л.С., Запороцкова И.В. Механизм создания композита на основе полипропилена, модифицированного углеродными нанотрубками разной слойности. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*. 2025; 28(1): 15–24. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202501.646>

Mechanism for creating a composite based on polypropylene modified with carbon nanotubes of various layer degree

L. S. Elbakyan✉, I. V. Zaporotskova

Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation

✉ *Corresponding author: lusniak-e@yandex.ru*

Abstract. Conductive polymers represent an interesting and promising class of materials with unique properties. They have good electrical conductivity, which makes them suitable for various applications in electronics. Conductive polymers are used in the production of organic light-emitting diodes, solar cells, transistors and sensors. Due to their sensitivity to environmental changes, conductive polymers can be used in various sensors, including gas and biosensors. Conductive polymers can be used to create antistatic coatings, which is especially important in electronics and manufacturing, in batteries, supercapacitors and other electrochemical systems. Due to their lightness and flexibility, conductive polymers open up new possibilities for the development of flexible and wearable electronics. Currently, research is quite widespread on the creation of new polymer materials, which are obtained by modifying known polymers with various fillers, including nanomaterials. One of the well-known nanomaterials is carbon nanotubes. The existing applications of nanotubes are almost limitless. In this paper, the well-known polymer polypropylene and carbon nanotubes are chosen as the main objects of study. The inclusion of conductive fillers in polypropylene will allow them to be used for many advanced electronics applications.

The work investigates the processes of interaction of single- and double-layered carbon nanotubes with a polypropylene monomer, as well as with its fragment. The structural features, the electron-energy structure of a polypropylene-based nanocomposite doped with carbon nanotubes, as well as the study of the mechanisms of interaction between CNTs and polypropylene fragments are investigated using the theory of density functional. The electron-energy structure of complexes formed by single- and double-layered carbon nanotubes and a fragment of polypropylene is analyzed. It has been established that the resulting composite material based on polypropylene will have conductive properties.

Keywords: polypropylene, single- and double-layered carbon nanotubes, polymer nanocomposites, electrical and sorption properties

Acknowledgments: The study was carried out within the framework of the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (topic “FZUU-2023-0001”).

For citation: Elbakyan L.S., Zaporotskova I.V. Mechanism for creating a composite based on polypropylene modified with carbon nanotubes of various layer degree. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki* = *Materials of Electronics Engineering*. 2025; 28(1): 15–24. <https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202501.646>

Введение

В последнее время исследователи активно работают над созданием композиционных полимерных материалов, армированных различными

наноматериалами, в том числе углеродными нанотрубками (УНТ) [1].

Анализ большого количества научных работ [2–7] показал, что УНТ благодаря своим выдающимся термическим, механическим, электриче-

ским и оптическим свойствам занимают особое место в сфере композитов. Постоянно растущий интерес к включению УНТ в различные матрицы стимулировал усилия по изготовлению полимерных нанокомпозитов на их основе и нанокомпозитов полимер/волокно с исключительными характеристиками [8—11]. Кроме того, разработка в области изготовления подобных материалов выделяется как одно из самых значительных достижений для нанонауки, биомедицинской, аэрокосмической, гражданской и другой промышленности. Выбор конкретной полимерной матрицы зависит от предполагаемого применения и желаемого сочетания свойств модифицированного материала.

Полупроводниковые полимерные композитные материалы находят применение в различных областях благодаря своим уникальным свойствам, таким как легкость, гибкость и возможность обработки при низких температурах. Эти материалы используются в гибких дисплеях, сенсорах и других устройствах, где требуется высокая степень гибкости. Подобные материалы успешно применяются в органических солнечных элементах, где они служат активным слоем для преобразования солнечной энергии в электрическую; в OLED-дисплеях и лампах, обеспечивая яркое свечение и низкое потребление энергии; для создания печатных схем, что позволяет снизить стоимость и упростить процесс производства, а также во многих других областях электроники.

Полипропилен (ПП) занимает важное место в мировом производстве синтетических пластиков. Его широкое применение в различных отраслях, таких как упаковка, автомобильная промышленность, медицина, текстиль, строительные материалы и т. д. способствует увеличению спроса. Ожидаемый рост производства ПП до 88 млн т к 2026 г. отражает тенденции увеличения потребления пластика, а также развитие технологий переработки и улучшения его свойств. Этот материал ценится во многих отраслях экономики благодаря своим физико-химическим свойствам. С точки зрения промышленного производства одним из наиболее востребованных свойств этого вещества является высокая химическая стойкость к различным видам соединений и веществ. В частности, ПП крайне нейтрален по отношению к химически агрессивным кислотам, основаниям и растворителям. Однако, он не устойчив к неполярным жидкостям, включая бензол, метилхлорид или четыреххлористый углерод. Еще одно свойство ПП — низкая паропроницаемость. В дополнение к хорошим изоляционным параметрам материал также отличается высокой воздухопроницаемостью и отсутствием водопоглощения [12—14]. Этот универсальный полимер широко используется при производстве волокон, плоских нитей, применяемых в бытовой технике,

электрических и медицинских приборах, автомобильных деталях и т. д.

Углеродные нанотрубки обладают целым набором свойств, представляющих интерес при изготовлении полимерных композитов с новым или улучшенным комплексом свойств. К ним относятся прочностные свойства, тепло- и электропроводность, оптические, магнитные, сорбционные и иные характеристики. Уже давно доказана перспективность использования УНТ для придания поверхности материалов высоких электропроводящих свойств [15—18]. Особое внимание ученые всего мира уделяют возможности создания проводящих полимеров и их потенциального применения. В последние годы многие проводящие полимеры используются для изготовления электронных устройств, аккумуляторных батарей, искусственных мышц, преобразования солнечной энергии и датчиков.

Уникальные проводящие механические и электрические свойства УНТ дают возможность применять эти наночастицы в качестве нанодобавок в полимерную матрицу для создания тензотермических датчиков. Композиционный материал на основе полимера и УНТ также может обеспечить эффективное экранирование от электромагнитного излучения благодаря их уникальным свойствам. Добавление УНТ в матрицу полимера открывает новые возможности для создания композиционных материалов с улучшенными электромагнитными экранирующими свойствами. Это может найти применение в различных областях, включая электротехнику, телекоммуникации и оборонную промышленность.

Углеродные нанотрубки считаются материалом с рекордно высокими значениями предела прочности на растяжение (≈ 60 ГПа) и модуля Юнга (≈ 1 ТПа), что предопределяется прочной химической sp^2 -связью между атомами углерода, составляющими нанотрубку. По данным квантово-химических расчетов модуля Юнга установлено, что УНТ с большим диаметром более прочные ($E = 1,2$ ТПа), чем трубки с меньшим диаметром ($E = 0,76$ ТПа); УНТ с конфигурацией *arm-chair* более прочные ($E = 1,2$ ТПа), чем трубки с тем же диаметром, но с конфигурацией «зиг-заг» ($E = 0,825$ ТПа) [16].

При обсуждении электрических свойств УНТ следует различать проводимость отдельных нанотрубок (одно- или многослойных), проводимость массива УНТ; и проводимость-материала, в котором изотропно или анизотропно распределены нанотрубки (рис. 1). Установлено, что электропроводность изолированной одностенной УНТ (ОУНТ) зависит от хиральности, наличия структурных дефектов, ковалентно присоединенных радикалов (ОН, СО и т. п.) и других факторов. Так, ахиральные

ОУНТ типа *arm-chair* обладают металлической проводимостью, а типа «зигзаг» — полупроводниковой. При условии низкой дефектности проводимость металлических ОУНТ составляет порядка 10^9 А/см². Для сравнения, медный провод выдерживает плотность тока не более 10^6 А/см², а при увеличении плотности тока расплавляется. Хиральные ОУНТ также могут обладать либо полупроводниковой, либо металлической проводимостью в зависимости от значения хирального угла (θ) и диаметра (d). В изолированных многостенных УНТ (МУНТ) соседние цилиндрические слои имеют различную хиральность, которая при переходе от одного слоя к другому изменяется случайным образом. Из-за относительно слабого взаимодействия между отдельными вложенными друг в друга графеновыми цилиндрами (расстояние между отдельными цилиндрами соответствует межплоскостному расстоянию в графите) электрический ток протекает преимущественно в стенке внешней трубки. В целом электропроводность МУНТ ниже, чем в случае ОУНТ. Электропроводность материала, составленного из УНТ, в значительной степени зависит от степени контакта между соседними трубками, а также от наличия и состава примесей. И, наконец, проводимость материала, в котором распределены нанотрубки, зависит от их содержания в дисперсионной среде. Существует понятие «перколяции», или «просачивания», в пористых и гетерофазных материалах. Введение небольшого количества (до 1 % (мас.)) электропроводящих нанотрубок с высоким аспектным соотношением в диэлектрическую матрицу приводит к появлению у нее электропроводящих свойств. Это обусловлено образованием единой электропроводящей сети в структуре материала [18, 19].

Как известно, основной проблемой получения композиционных материалов является обеспече-

ние равномерного диспергирования нанонаполнителей в полимерной матрице. Это и во многом определяет свойства полученных композиционных материалов.

Результаты теоретического исследования полимерных композитных материалов на основе полипропилена и одно- двуслойных углеродных нанотрубок

Исследование механизма образования композиционного материала ПП/УНТ. В работе [20] отмечается, что основным механизмом возможности создания полимерных композитных материалов допированием УНТ является адсорбционное взаимодействие компонентов комплекса. Для выяснения применимости данного вывода к нанокompозиту ПП/УНТ были исследованы процессы взаимодействия УНТ с мономером ПП. Для изучения особенностей структуры, электронно-энергетического строения нанокompозита на основе ПП, допированного УНТ, а также исследования механизмов взаимодействия между УНТ и фрагментами ПП, применена теория функционала плотности [21, 22]. Суть данного метода заключается в использовании при описании атомно-молекулярных систем распределения электронной плотности. Для исследования системы был выбран гибридный метод приближения, а именно метод ВЗЛУР. Главным достоинством метода является его высокая точность. Расчеты велись с применением валентно-расщепленного базисного набора типа 3-21G. Данный функционал с выбранным базисным набором хорошо адаптирован под выбранные системы.

Выполнены теоретические исследования процесса взаимодействия структурной единицы наноматериала — ПП, с поверхностью одно- и двухслойных УНТ методом квантово-химического

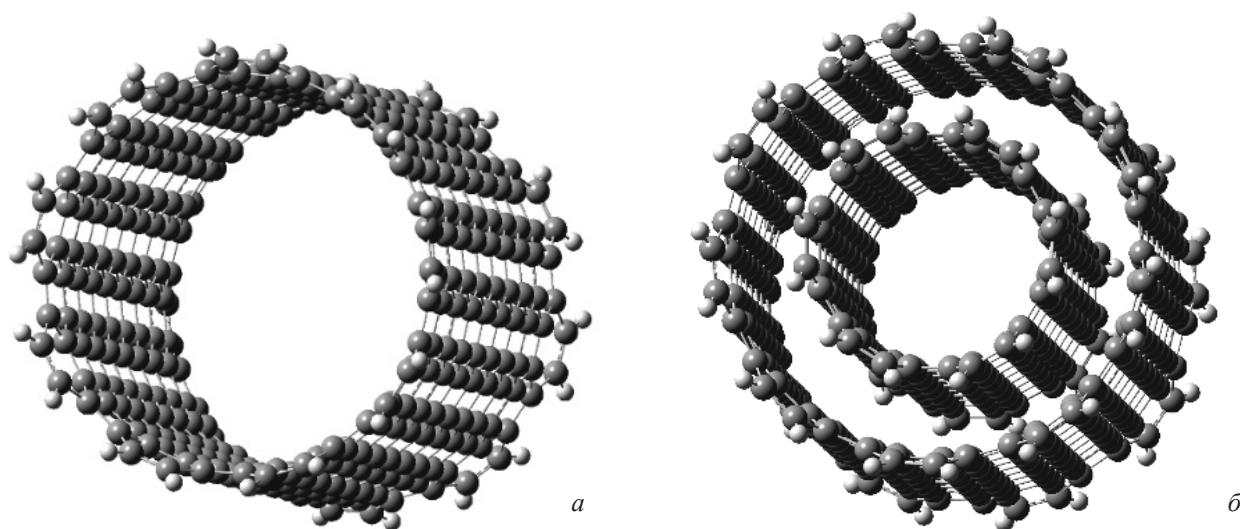


Рис 1. Вид нанотрубок различных модификаций: а — ОУНТ типа (9,9); б — МУНТ типа (9,9) и (6,6)

Fig. 1. View of nanotubes of various modifications: (a) SWCNT type (9,9); (b) MWCNT type (9,9) and (6,6)

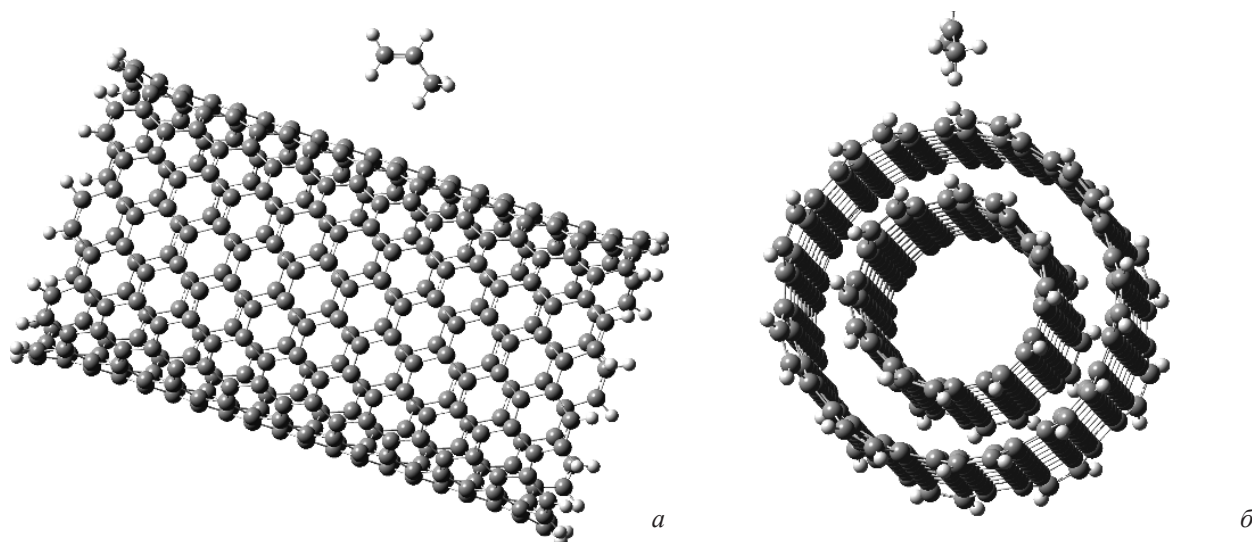


Рис. 2. Варианты ориентации мономера относительно УНТ на примере: а — однослойного УНТ; б — двухслойного УНТ
Fig. 2. Variants of monomer orientation relative to CNT using the example of: (a) single-layer CNT; (b) double-layer CNT

моделирования в программном продукте Gaussian [23, 24] с использованием расчетного метода DFT.

Проведены расчеты энергетических характеристик процессов адсорбции одного мономерного звена (C_3H_6) ПП на однослойных УНТ ахирального вида типа *arm chair* с индексами хиральности (9,9) и двухслойных УНТ ахирального вида того же типа с индексами хиральности (6,6) — у внутренней УНТ и (9,9) — у внешней (рис. 2). Оборванные границы кластера были замкнуты псевдоатомами водорода. Длина кластера составила $\sim 0,23$ нм, диаметр внутренней и внешней УНТ — 0,8 и 1,37 нм соответственно, общее число атомов — 660. Длина кластера выбрана таким образом, чтобы избежать влияния краевых эффектов на процесс. Псевдоатомы использованы для компенсации разорванных химических связей на границе кластера. В рассматриваемом случае атомы водорода, играющие роль псевдоатомов, хорошо подходят для этой роли.

В ходе квантово-химических исследований также были проанализированы карты электростатического потенциала, известные как карты

электростатической потенциальной энергии, или поверхности молекулярного электрического потенциала, иллюстрирующие трехмерное распределение зарядов молекул. При изучении распределения электростатического потенциала и анализе естественных связывающих орбиталей (NBO) выявлены активные центры, ответственные за межмолекулярное взаимодействие. В молекуле ПП активным центром оказался атом водорода.

Моделирование процесса адсорбции структурной единицы ПП — мономера C_3H_6 к центральной части кластера УНТ, производилось пошаговым приближением молекулы активным центром атома водорода к выбранному атому углерода нанотрубки перпендикулярно к поверхности УНТ (прямая перемещения мономера перпендикулярна продольной оси нанотрубки).

В результате выполненных расчетов были получены значения энергии систем на каждом шаге, позволившие построить кривые зависимости энергии взаимодействия от расстояния между выбранным мономером и УНТ (рис. 3).

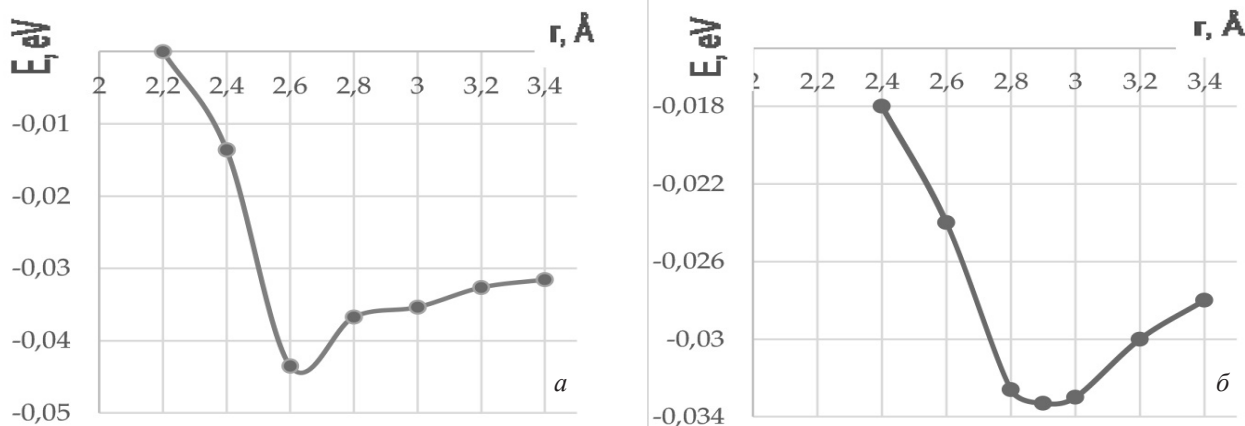


Рис. 3. Энергетические кривые взаимодействия мономера C_3H_6 : а — с ОУНТ типа (9,9); б — с МУНТ типа (6,6) и (9,9)
Fig. 3. Energy curves of the interaction of the C_3H_6 monomer: (a) with SWCNT (9,9); (b) with MWCNT (6,6) and (9,9)

Таблица 1 / Table 1

Результаты адсорбционного взаимодействия мономера C_3H_6 и фрагмента полипропилена $(-C_3H_6-)_{15}$
Results of adsorption interaction of monomer C_3H_6 and polypropylene fragment $(-C_3H_6-)_{15}$

Тип УНТ	Активный центр	C_3H_6		$(-C_3H_6-)_{15}$	
		Расстояние адсорбции, $R_{ад}$, нм	Энергия адсорбции, ΔE_a , мэВ	Расстояние адсорбции, $R_{ад}$, нм	Энергия адсорбции, ΔE_a , мэВ
ОУНТ	H	2,6	1,60	0,30	7,21
МУНТ	H	2,9	3,33	0,30	7,86

Установлено, что каждая из полученных кривых имеет минимум, соответствующий взаимодействию на определенных расстояниях.

Энергия адсорбции вычислялась как разность полных энергий адсорбционного комплекса и суммы энергий невзаимодействующих УНТ и исследуемого мономера (C_3H_6):

$$\Delta E_a = E_{ад.к} - (E_{УНТ} + E_{мон}), \quad (1)$$

где $E_{ад.к}$ — энергия адсорбционного комплекса, полученная в результате расчетов; $E_{УНТ}$ — энергия чистого тубулена УНТ; $E_{мон}$ — энергия C_3H_6 .

При расчете ΔE_a был обнаружен факт взаимодействия (адсорбции) мономера C_3H_6 с кластером УНТ:

– значение энергии при взаимодействии C_3H_6 и однослойным УНТ оказалось равным 1,60 мэВ, расстояние адсорбции ($R_{ад}$) — 0,26 нм;

– значение энергии адсорбции при взаимодействии C_3H_6 и двухслойным УНТ составило 3,33 мэВ на расстоянии ($R_{ад}$) — 0,29 нм.

Результаты взаимодействия представлены в табл. 1.

Таким образом, полученные расстояния адсорбции позволяют утверждать, что процесс взаимодействия мономера ПП с однослойной УНТ приводит к возникновению химической адсорбции, а при взаимодействии с двухслойной трубкой физической адсорбции мономера.

Для подтверждения возможности создания комплекса «ПП + УНТ» был исследован процесс взаимодействия одно- и двухслойных УНТ с фрагментом ПП, содержащим несколько структурных единиц — мономеров ПП. С этой целью, основываясь на результатах выполненных теоретических исследований, представленных выше, были выполнены DFT-расчеты процессов взаимодействия одно- и двухслойных УНТ, обладающих адсорбционной активностью при взаимодействии со структурным составляющим (мономером) полиметилметакрилата, с фрагментом полиметилметакрилата $[-CH_2CH(CH_3)-]_n$, состоящего из 15 структурных единиц ($n = 15$). На рис. 4 представлен данный фрагмент ПП.

Моделирование процесса адсорбции фрагмента C_3H_6 полипропилена, состоящего из 15-структурных единиц ПП, к центральной части кластера УНТ производилось по принципу, описанному ранее.

При расчете ΔE_a обнаружен факт физического взаимодействия фрагмента $(-C_3H_6-)_{15}$ с кластером УНТ (см. табл. 1) для обоих видов нанотрубок:

– значение энергии при взаимодействии C_3H_6 и однослойным УНТ оказалось равным 7,21 мэВ, расстояние адсорбции ($R_{ад}$) — 0,30 нм;

– значение энергии адсорбции при взаимодействии C_3H_6 и двухслойным УНТ составило 7,86 мэВ на расстоянии ($R_{ад}$) — 0,30 нм.

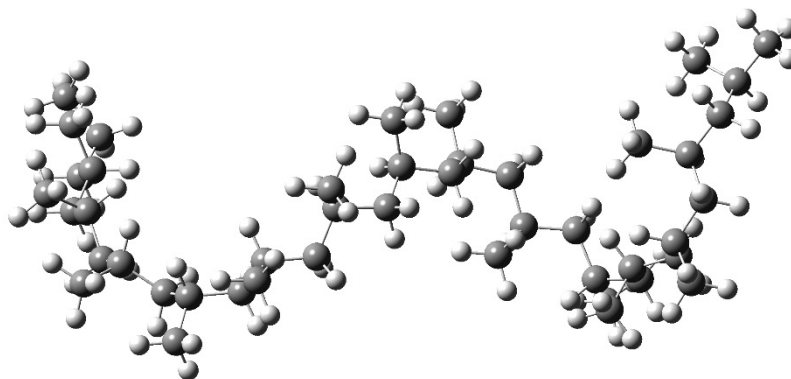


Рис. 4. Полипропилен, состоящий из 15 мономерных звеньев

Fig. 4. Polypropylene consisting of 15 monomer units

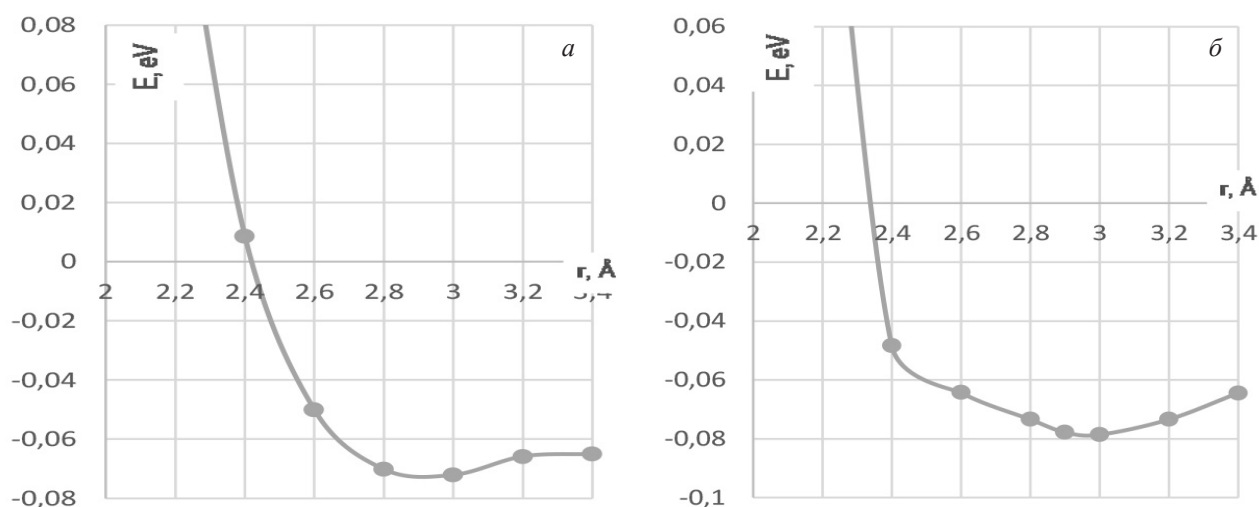


Рис. 5. Энергетические кривые взаимодействия $(-C_2H_6-)_{15}$: а — с ОУНТ типа (9,9); б — с МУНТ типа (6,6) и (9,9)
 Рис. 5. Energy curves of the interaction of the $(-C_2H_6-)_{15}$: (a) with SWCNT (9,9); (b) with MWCNT (6,6) and (9,9)

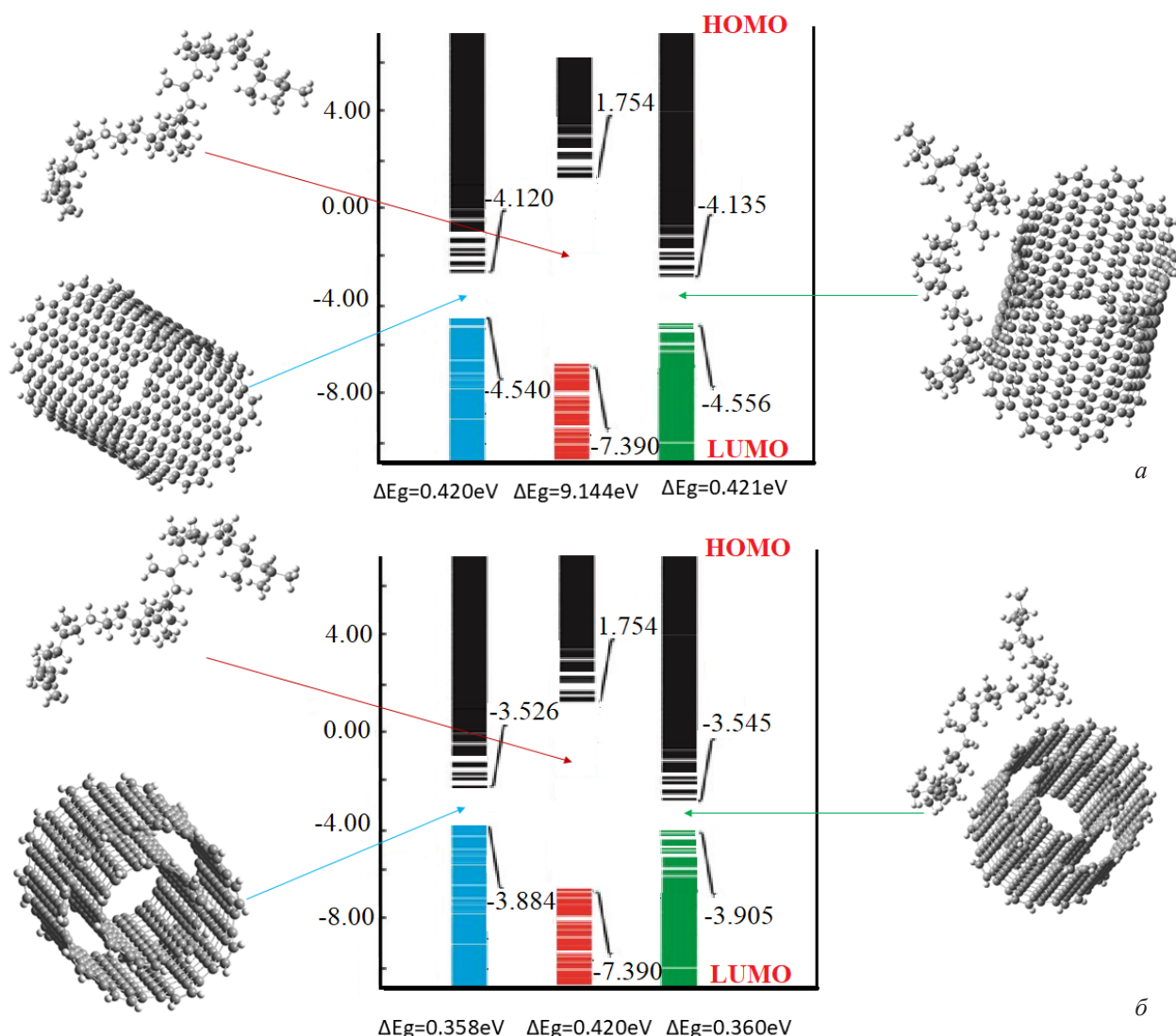


Рис. 6. Визуализация одноэлектронных уровней энергии кластеров УНТ/ПП, моделирующих структуру композитного полимерного материала. Расчет энергий мономера проведен в программе Gaussian с использованием функционала B3LYP и демонстрирует влияние однослойных (а) и двухслойных (б) УНТ на ширину запрещенной зоны полимерного материала
 Fig. 6. Visualization of single-electron energy levels of CNT/PP clusters simulating the structure of a composite polymer material. The monomer energies were calculated in the Gaussian program using the B3LYP functional and demonstrate the influence of single-layer (a) and double-layer (b) CNTs on the band gap width of the polymer material

Таким образом, установленный факт взаимодействия структурной единицы полимерного материала с поверхностью ахиральных одно- и двухслойных УНТ позволяет прогнозировать возможность создания стабильных комплексов композитного полимерного материала на основе ПП, армированного нанотрубками.

Особенности электронно-энергетического строения полученных полимерных нанокомпозитов на основе ПП и УНТ. Выполнен анализ электронно-энергетического строения комплексов, образованных одно- и двухслойными УНТ и фрагментом ПП $[-CH_2CH(CH_3)-]_n$, содержащего 15 структурных единиц. Анализ ширины запрещенной зоны (ΔE_g) адсорбционных комплексов, определяемой как разность энергий верхней заполненной (LUMO) и нижней вакантной (HOMO) орбиталей, обнаружил, что система по типу проводимости представляет собой полупроводник (ΔE_g варьируется от 0,36 до 0,42 эВ для разных комплексов). Таким образом, введение рассматриваемых нанотрубок в полимерную матрицу ПП, являющуюся по типу проводимости диэлектриком, проводит к появлению полупроводящих свойств у полученного полимерного нанокомпозита. Значения энергий орбиталей были рассчитаны с помощью программы Gaussview, которая представляет собой набор подпрограмм, применяемых в сочетании с основной программой Gaussian. Результаты исследования ΔE_g представлены на рис. 6.

Таким образом, полученные результаты позволяют прогнозировать возможность применения нанокомпозитов на основе ПП, допированного одно- и двухслойными УНТ, в качестве материала

приборов наноэлектроники, обладающего полупроводниковыми свойствами.

Заключение

На основании теоретических расчетов, выполненных с использованием метода DFT, доказана адсорбционная активность структурных единиц полимера ПП в отношении одно- и двухслойных УНТ, используемых для модифицирования выбранного полимера. Полученные результаты доказывают, что основным механизмом, позволяющим получать стабильные полимерные комплексы, допированные УНТ, является адсорбционное взаимодействие фрагмента рассматриваемого полимера с одно- и двухслойными УНТ.

Изучены и проанализированы особенности электронно-энергетического строения полимерного нанокомпозита на основе ПП, допированного УНТ. Установлено, что ширина запрещенной зоны ΔE_g адсорбционных комплексов, определяемая как разность энергий верхней заполненной и нижней вакантной орбиталей, по типу проводимости позволяет отнести созданный нанокомпозит к полупроводникам, что отличает его от исходного полимера, обладающего диэлектрической проводимостью.

Благодаря отличным свойствам рассматриваемого полимера, а также полученным результатам возможно прогнозировать создание новых композитных полимерных материалов с варьируемыми проводящими свойствами, которые могут найти широкое применение в электронике, а именно, в качестве электродных материалов, различных транзисторов, солнечных элементов, сенсорных элементов.

Библиографический список

1. Шевченко В.Г. Основы физики полимерных композиционных материалов. М.: МГУ имени М.В. Ломоносова; 2010. 99 с.
2. Полимерные нанокомпозиты. Под ред. Ю.–В. Май, Ж.–Ж. Ю. Пер. с англ. М.: Техносфера; 2011. 688 с.
3. Stern T., Marom G. Failure mechanisms and strength of polymer nanocomposites: A brief review. *Journal of Composites Science*. 2024; 8(10): 395. <https://doi.org/10.3390/jcs8100395>
4. Lu D., Huo Y., Jiang Zh., Zhong J. Carbon nanotube polymer nanocomposites coated aggregate enabled highly conductive concrete for structural health monitoring. *Carbon*. 2023; 206(1): 340–350. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2023.02.043>
5. Rathinavel S., Priyadharshini K., Panda Dh. A review on carbon nanotube: An overview of synthesis, properties, functionalization, characterization, and the application. *Materials Science and Engineering: B*. 2021; 268(3): 115095. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2021.115095>
6. Fenta E.W., Mebratie B.A. Advancements in carbon nanotube–polymer composites: Enhancing properties and applications through advanced manufacturing techniques. *Heliyon*. 2024; 10(1): e36490. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e36490>
7. Maghimaa M., Sagadevan S., Boojhana E., Is F., Lett J.A., Moharana Sr., Garg S., Al–Anber M.A. Enhancing biocompatibility and functionality: Carbon nanotube–polymer nanocomposites for improved biomedical applications. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*. 2024; 99(8): 105958. <https://doi.org/10.1016/j.jddst.2024.105958>
8. Spitalsky Zd., Tasis D., Papagelis K., Galiotis C. Carbon nanotube–polymer composites: Chemistry, processing, mechanical and electrical properties. *Progress in Polymer Science*. 2010; 35(3): 357–401. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2009.09.003>
9. Soni S.K., Thomas B., Thomas Sh.B., Tile Pr.S., Sakharwade S.G. Carbon nanotubes as exceptional nanofillers in polymer and polymer/fibernanocomposites: An extensive review. *Materials Today Communications*. 2023; 37: 107358 <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.107358>
10. Kil T., Jin D.W., Yang B., Lee H.K. A comprehensive micromechanical and experimental study of the electrical conductivity of polymeric composites incorporating carbon nanotube and carbon fiber. *Composite*

Structures. 2021; 268(6): 114002. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.114002>

11. Kim G.M., Yang B.J., Cho K.J., Kim E.M., Lee H.K. Influences of CNT dispersion and pore characteristics on the electrical performance of cementitious composites. *Composite Structures*. 2017; 164: 32—42. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.12.049>

12. Nicholas P. Cheremisinoff condensed encyclopedia of polymer engineering terms book. Boston: Butterworth-Heinemann; 2001. 362 p.

13. Greene J.P. Greene automotive plastics and composites: materials and processing. William Andrew; 2021. 392 p.

14. Campo E.A. Selection of polymeric materials: How to select design properties from different standards. William Andrew; 2008. 350 p.

15. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. М.: Бином. Лаборатория знаний; 2005. 196 с.

16. Запорожкова И.В. Углеродные и не углеродные наноматериалы и композитные структуры на их основе: строение и электронные свойства. Волгоград: ВолГУ; 2009. 490 с.

17. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки. *Успехи физических наук*. 1997; 167(9): 945—972. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199709b.0945>

18. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: Бином. Лаборатория знаний; 2010. 490 с.

19. Елецкий А.В. Сорбционные свойства углеродных наноструктур. *Успехи физических наук*. 2004; 174(11): 1191—1231. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0174.200411c.1191>

20. Elbakyan L., Zaporotskova I., Hayrapetyan D. Nanocomposite material based on polyvinyl alcohol modified with carbon nanotubes: Mechanism of formation and electronic energy structure. *Journal of Composites Science*. 2024; 8(2): 54. <https://doi.org/10.3390/jcs8020054>

21. Tsuneda T. Electronic motion: Density functional theory (DFT). In: *Ideas of quantum chemistry*. Elsevier; 2007. P. 567—614. <https://doi.org/10.1016/b978-044452227-6/50012-0>

22. Hopmann K.H., Himo F. Quantum chemical modeling of enzymatic reactions – applications to epoxide-transforming enzymes. *Comprehensive Natural Products II*. 2010; 8: 719—747. <https://doi.org/10.1016/b978-008045382-8.00160-x>

23. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuse-ria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R. et al. Gaussian 09, Revision A.01. Gaussian, Inc., Wallingford; 2009.

24. Элбакян Л.С. Квантово-химические расчеты с применением программного пакета Gaussian и графического редактора Gaussview. Волгоград: ВолГУ; 2022. 81 с.

References

1. Shevchenko V.G. Fundamentals of physics of polymer composite materials. Moscow: MGU im. M.V. Lomonosova; 2010. 99 p. (In Russ.)

2. Mai Y.-W., Yu Zh.-Zh. (eds.). Polymer nanocomposites. Woodhead Publishing; 2006. 608 p. (Russ. transl. from: Polimernye nanokompozity. Moscow: Tekhnosfera; 2011. 688 p.)

3. Stern T., Marom G. Failure mechanisms and strength of polymer nanocomposites: A brief review. *Journal of Composites Science*. 2024; 8(10): 395. <https://doi.org/10.3390/jcs8100395>

4. Lu D., Huo Y., Jiang Zh., Zhong J. Carbon nanotube polymer nanocomposites coated aggregate enabled highly conductive concrete for structural health monitoring. *Carbon*. 2023; 206(1): 340—350. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2023.02.043>

5. Rathinavel S., Priyadharshini K., Panda Dh. A review on carbon nanotube: An overview of synthesis, properties, functionalization, characterization, and the application. *Materials Science and Engineering: B*. 2021; 268(3): 115095. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2021.115095>

6. Fenta E.W., Mebratie B.A. Advancements in carbon nanotube–polymer composites: Enhancing properties and applications through advanced manufacturing techniques. *Heliyon*. 2024; 10(1): e36490. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e36490>

7. Maghimaa M., Sagadevan S., Boojhana E., Is F., Lett J.A., Moharana Sr., Garg S., Al-Anber M.A. Enhancing biocompatibility and functionality: Carbon nanotube–polymer nanocomposites for improved biomedical applications. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*. 2024; 99(8): 105958. <https://doi.org/10.1016/j.jddst.2024.105958>

8. Spitalsky Zd., Tasis D., Papagelis K., Galotis C. Carbon nanotube–polymer composites: Chemistry, processing, mechanical and electrical properties. *Progress in Polymer*

Science. 2010; 35(3): 357—401. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2009.09.003>

9. Soni S.K., Thomas B., Thomas Sh.B., Tile Pr.S., Sakharwade S.G. Carbon nanotubes as exceptional nanofillers in polymer and polymer/fibernanocomposites: An extensive review. *Materials Today Communications*. 2023; 37: 107358 <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.107358>

10. Kil T., Jin D.W., Yang B., Lee H.K. A comprehensive micromechanical and experimental study of the electrical conductivity of polymeric composites incorporating carbon nanotube and carbon fiber. *Composite Structures*. 2021; 268(6): 114002. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.114002>

11. Kim G.M., Yang B.J., Cho K.J., Kim E.M., Lee H.K. Influences of CNT dispersion and pore characteristics on the electrical performance of cementitious composites. *Composite Structures*. 2017; 164: 32—42. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.12.049>

12. Nicholas P. Cheremisinoff condensed encyclopedia of polymer engineering terms book. Boston: Butterworth-Heinemann; 2001. 362 p.

13. Greene J.P. Greene automotive plastics and composites: materials and processing. William Andrew; 2021. 392 p.

14. Campo E.A. Selection of polymeric materials: How to select design properties from different standards. William Andrew; 2008. 350 p.

15. D'yachkov P.N. Carbon nanotubes: structure, properties, applications. Moscow: Binom. Laboratoriya znaniy; 2005. 196 p. (In Russ.)

16. Zaporotskova I.V. Carbon and non-carbon nanomaterials and composite structures based on them: structure and electronic properties. Volgograd: VoLGu; 2009. 490 p. (In Russ.)

17. Eletski A.V. Carbon nanotubes. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 1997; 167(9): 945—972. (In Russ.). <https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199709b.0945>
18. D'yachkov P.N. Electronic properties and applications of nanotubes. Moscow: Binom. Laboratoriya znaniy; 2010. 490 p. (In Russ.)
19. Eletski A.V. Sorption properties of carbon nanostructures. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 2004; 174(11): 1191—1231. (In Russ.). <https://doi.org/10.3367/UFNr.0174.200411c.1191>
20. Elbakyan L., Zaporotskova I., Hayrapetyan D. Nanocomposite material based on polyvinyl alcohol modified with carbon nanotubes: Mechanism of formation and electronic energy structure. *Journal of Composites Science*. 2024; 8(2): 54. <https://doi.org/10.3390/jcs8020054>
21. Tsuneda T. Electronic motion: Density functional theory (DFT). In: *Ideas of quantum chemistry*. Elsevier; 2007. P. 567—614. <https://doi.org/10.1016/b978-044452227-6/50012-0>
22. Hopmann K.H., Himo F. Quantum chemical modeling of enzymatic reactions – applications to epoxide-transforming enzymes. *Comprehensive Natural Products II*. 2010; 8: 719—747. <https://doi.org/10.1016/b978-008045382-8.00160-x>
23. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., et al. Gaussian 09, Revision A.01. Gaussian, Inc., Wallingford; 2009.
24. Elbakyan L.S. Quantum chemical calculations using the Gaussian software package and the Gaussview graphics editor. Volgograd: VolGU; 2022. 81 p. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Элбакян Лусине Самвеловна — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения, Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>; e-mail: lusniak-e@yandex.ru

Запороцкова Ирина Владимировна — доктор физ.-мат. наук, директор института приоритетных технологий, Волгоградский государственный университет, Университетский просп., д. 100, Волгоград, 400062, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9486-2482>; e-mail: zaporotskova@volsu.ru

Lusine S. Elbakyan — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Department of Forensic Science and Physical Materials Science, Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>; e-mail: lusniak-e@yandex.ru

Irina V. Zaporotskova — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Director of the Institute of Priority Technologies, Volgograd State University, 100 Universitetsky Ave., Volgograd 400062, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9486-2482>; e-mail: zaporotskova@volsu.ru

Поступила в редакцию 24.01.2025; поступила после доработки 25.03.2025; принята к публикации 31.03.2025
Received 24 January 2025; Revised 25 March 2025; Accepted 31 March 2025

* * *