

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА ПОЛИЭТИЛЕН-УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ

ГАЛИН Айдар Мансурович

КУПОВА Ольга Юрьевна

Уфимский государственный нефтяной технический университет
г. Уфа, Россия

В работе проведено моделирование нанокompозита на основе полиэтилена с добавлением углеродных нанотрубок (CNT) с целью оценки влияния наполнителя на свойства полимерной матрицы. CNT рассматриваются как перспективный модификатор благодаря высокой прочности, теплопроводности и способности придавать электропроводность. Моделирование выполнялось в программной среде Materials Studio с применением молекулярной динамики и периодических граничных условий. Полученные результаты показывают, что нанотрубки равномерно распределяются в полимере, формируя прочные межфазные связи. Это приводит к улучшению прочности, теплостойкости, износостойкости и электропроводности материала. Энергия взаимодействия между компонентами указывает на хорошую совместимость ПЭ и CNT. Представленный подход подтверждает эффективность численного моделирования для прогнозирования свойств нанокompозитов и выбора оптимального состава.

Ключевые слова: нанокompозит, полиэтилен, углеродные нанотрубки, молекулярное моделирование, прочность, теплопроводность, межфазное взаимодействие, термическая устойчивость.

Введение. Создание полимерных материалов с улучшенными характеристиками является важным направлением в разработке новых композиций для технического и промышленного применения. Одним из эффективных подходов к модификации свойств полиэтилена является введение углеродных нанотрубок (CNT), кото-

рые способны улучшить прочностные, тепловые и электрофизические параметры. В настоящей работе представлено сравнительное исследование характеристик чистого полиэтилена и его композита с углеродными нанотрубками.

Сравнение ключевых характеристик представлено в таблице 1.

Таблица 1

СВОЙСТВА ЧИСТОГО ПОЛИЭТИЛЕНА (ПЭ) И КОМПОЗИТА ПОЛИЭТИЛЕНА С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ (ПЭ + CNT)

Свойство	Чистый ПЭ	ПЭ + CNT
Прочность (МПа)	20–30	60–80
Теплопроводность (Вт/(м·К))	0,4–0,5	1,0–2,0
Электропроводность (См/м)	$\sim 10^{-16}$	10^{-3} – 10^{-2}
Стойкость к истиранию (мг/км)	100–150	30–50
Ударная вязкость (кДж/м ²)	10–15	20–30
Термическая устойчивость (°С)	120–140	200–300

Методы исследования. Для исследования свойств нанокompозита полиэтилен-углеродные нанотрубки использовалось молекулярное моделирование в программной среде Materials Studio. Были построены модельные структуры композита с различным распреде-

лением углеродных нанотрубок. Применялись периодические граничные условия, а взаимодействия рассчитывались на основе современных силовых полей. Расчёты включали стадию релаксации структуры и оценку энергетических характеристик, что позволи-

ло определить устойчивость системы и силу межмолекулярного взаимодействия между компонентами [1; 2].

Результаты исследований. Моделирование показало, что углеродные нанотрубки равномерно распределяются в объеме полиэтилена, формируя устойчивую структуру с выраженным межфазным взаимодействием. Энергия взаимодействия между ПЭ и CNT

составила $-77,11$ ккал/моль, что свидетельствует о высокой стабильности образуемой системы. При этом наблюдается повышение прочности материала, увеличение теплопроводности и износостойкости. Кроме того, материал приобретает электропроводящие свойства, что делает его пригодным для применения в электронной технике и механически нагруженных средах [3; 4].

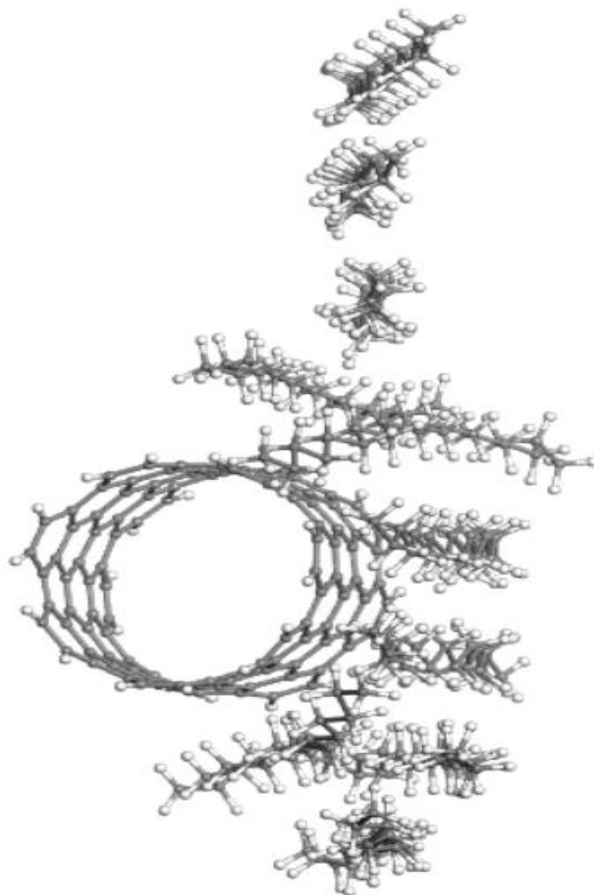


Рисунок 1. Комплекс ПЭ – наполнитель (CNT)

Выводы. На основе проведенного молекулярного моделирования установлено, что внедрение углеродных нанотрубок в полиэтиленовую матрицу приводит к формированию устойчивой композиционной структуры с выраженными межфазными взаимодействиями. Это способствует существенному улучшению эксплуатационных характеристик материала. Композит проявляет повышенную прочность, улучшенную теплопроводность, а также повышенную устойчивость к термическим и ме-

ханическим нагрузкам. Кроме того, материал приобретает электропроводящие свойства, что расширяет спектр его потенциальных применений, включая электронику, машиностроение и эксплуатацию в условиях высоких температур. Полученные результаты подтверждают эффективность использования численного моделирования для оценки свойств нанокомпозитов и выбора рациональных сочетаний матрицы и нанонаполнителя на этапе проектирования новых материалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов А.Г. Моделирование структуры полимерных композитов с нанонаполнителями. – СПб.: Химиздат, 2022. – 260 с.
2. Иванов А.В., Петрова Е.С. Полиэтилен и его модификации: современные технологии и свойства. – М.: Наука, 2020. – 320 с.
3. Коваленко Н.С., Петрова Е.А. Наноматериалы и композиты: физико-химические основы. – Екатеринбург: УрО РАН, 2021. – 235 с.
4. Смирнов И.В. Полимерные нанокомпозиты: технология синтеза и свойства. – М.: Наука, 2020. – 310 с.

MODELING AND STUDYING THE PROPERTIES OF POLYETHYLENE-CARBON NANOTUBES NANOCOMPOSITE

GALIN Aidar Mansurovich

KUPOVA Olga Yurievna

Ufa State Petroleum Technological University

Ufa, Russia

The paper presents a modeling of a polyethylene-based nanocomposite with carbon nanotubes (CNT) added to evaluate the effect of the filler on the properties of the polymer matrix. CNT is considered a promising modifier due to its high strength, thermal conductivity, and ability to impart electrical conductivity. The modeling was performed in the Materials Studio software environment using molecular dynamics and periodic boundary conditions. The results show that the nanotubes are uniformly distributed in the polymer, forming strong interphase bonds. This leads to improved strength, heat resistance, wear resistance, and electrical conductivity of the material. The interaction energy between the components indicates good compatibility of PE and CNT. The presented approach confirms the effectiveness of numerical modeling for predicting the properties of nanocomposites and choosing the optimal composition.

Keywords: nanocomposite, polyethylene, carbon nanotubes, molecular modeling, strength, thermal conductivity, interphase interaction, thermal stability.