Композитный материал на основе полиамида PA-6, модифицированного углеродными нанотрубками: физико-механические свойства и механизм образования

Запороцкова И.В. [1] , *Запороцков П.А.* [1] , *Элбакян Л.С.* [1]

irinazaporotskova@gmail.com

[1] Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

В последние годы растет интерес исследователей к созданию новых композитных материалов на основе известных полимеров [1,2]. В числе таких полимеров может быть назван полиамид PA6, структура которого состоит из повторяющихся единиц аминокапроновой кислоты. Этот полимер может быть модифицирован добавлением наполнителей для улучшения определенных свойств в зависимости от конкретного применения. Одним из наиболее перспективных модификаторов полимеров являются углеродные нанотрубки (УНТ). Нами были приготовлены образцы композитных материалов на основе полиамида PA6, допированных УНТ. Рассмотрены несколько вариантов композитов, содержащих различное количество нанотрубок: 0,015%, 0,03 %, 0,05 %. Исследованы основные механические характеристики полученных композитов, которые позволили определить наиболее предпочтительную концентрацию нанотрубок, благодаря которой получаются композиты с наилучшими физико-механическими свойствами.

Было выполнено моделирование процесса взаимодействия УНТ с фрагментом PA6 с использованием метода DFT. Исследован процесс присоединения фрагмента к поверхности однослойной УНТ (6, 0), определены основные параметры взаимодействия и особенности электронно-энергетического строения полученных систем. Доказано, что основным механизмом, приводящем к созданию композита на основе полимера PA6, модифицированного УНТ, является вандерваальсово взаимодействие компонентов композита на расстоянии 3,1 Å, энергия взаимодействия 1,58 эВ. Полученный композит является узкощелевым полупроводником.

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

Ссылки

1. de Oliveira, A.D.; Beatrice, C.A.G. Polymer Nanocomposites with Different Types of Nanofiller. In *Nanocomposites—Recent Evolutions*; Intechopen: London, UK, **2019**; p. 230.
2. Lu, D.; Huo, Y.; Jiang, Z.; Zhong, J. Carbon nanotube polymer nanocomposites coated aggregate enabled highly conductive concrete for structural health monitoring. *J. Carbon* **2023**, 206, 340–350.