



Исследование проводящих свойств композитных полимерных материалов на основе поливинилпирролидона, допированных одно- и двухслойными нанотрубками



Л. С. Элбакян, И. В. Запороцкова[✉]

Волгоградский государственный университет, Россия, 400062, г. Волгоград, Университетский проспект, д. 100

Элбакян Лусине Самвеловна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения, lusniak-e@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 675646

Запороцкова Ирина Владимировна, доктор физико-математических наук, директор Института приоритетных технологий, профессор кафедры судебной экспертизы физического материаловедения, irinazaporotskova@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 42151

Аннотация. На сегодняшний день проводящие полимеры являются одной из самых динамично развивающихся областей материаловедения, объединяя химию, физику и нанотехнологии. Проводящие полимеры особенно востребованы в области гибкой электроники, энергетики и биомедицины. В связи с этим резко возрос интерес к полимерным нанокомпозитам на основе углеродных нанотрубок благодаря их уникальному сочетанию свойств, недостижимому для традиционных полимеров. Новые материалы смогут сочетать в себе высокую проводимость с лёгкостью и биосовместимостью, открывая новые возможности к инновационным технологиям.

В данной работе в качестве основных объектов выбран известный полимер поливинилпирролидон и углеродные нанотрубки. Проведено теоретическое исследование возможности создания стабильного комплекса «Полимер-Углеродные нанотрубки» с использованием квантово-химического расчетного метода теории функционала плотности. Исследовано влияние слойности углеродных нанотрубок на адсорбционное взаимодействие комплекса, состоящего из фрагмента полимера поливинилпирролидон и молекулярного кластера углеродной нанотрубки. Для этого использованы одно- и двухслойные углеродные нанотрубки. Анализ карт электростатических потенциалов и зарядовых распределений в рассмотренных системах позволил объяснить механизм взаимодействия компонентов полимерных композитов для выбранного полимера и нанотрубок. Далее проведен анализ электронно-энергетического строения полученных полимерных нанокомпозитов. На основании полученных данных сделан вывод о проводящих свойствах полученного комплекса.

Ключевые слова: поливинилпирролидон, одно- и двухслойные углеродные нанотрубки, метод теории функционала плотности (DFT), адсорбционное взаимодействие, электронно-энергетическое строение, полимерные нанокомпозиты, проводящие свойства

Благодарности: Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации («FZUU-2023-0001»).

Для цитирования: Элбакян Л. С., Запороцкова И. В. Исследование проводящих свойств композитных полимерных материалов на основе поливинилпирролидона, допированных одно- и двухслойными нанотрубками // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 495–504. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-495-504>, EDN: XKDYPG

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Investigation of the conductive properties of composite polymer materials based on polyvinylpyrrolidone doped with single and double-walled nanotubes

L. S. Elbakyan, I. V. Zaporotskova[✉]

Volgograd State University, 100 Universitetskiy Prospekt, Volgograd 400062, Russia

Lusine S. Elbakyan, lusniak-e@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 675646

Irina V. Zaporotskova, irinazaporotskova@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 42151

Abstract. Background and Objectives: Today, conductive polymers are one of the most dynamically developing fields of materials science, combining chemistry, physics and nanotechnology. Conductive polymers are particularly in demand in the fields of flexible electronics, energy, and biomedicine. In this regard, there has been a sharp increase in interest in polymer nanocomposites based on carbon nanotubes due to their unique combination of properties unattainable by traditional polymers. The new materials will be able to combine high conductivity with lightness and biocompatibility. This will create new opportunities for innovative technologies. In this work, the well-known polymer polyvinylpyrrolidone and carbon nanotubes are selected as the main objects. A theoretical study has been conducted on the possibility of creating the stable complex



"Polymer – Carbon nanotubes". **Materials and Methods:** In this paper, the quantum chemical method of density functional theory is used to study the structural features, interaction mechanisms, and electron-energy structure of a polyvinylpyrrolidone-based nanocomposite doped with carbon nanotubes. A hybrid approximation method, namely the B3LYP method, was chosen to study the system. The calculations were performed using a valence-split 3-21G type basic set. **Results:** The effect of CNT layering on the adsorption interaction of a complex consisting of a fragment of a polyvinylpyrrolidone polymer and a molecular cluster of a carbon nanotube has been studied. For this purpose, single- and double-walled carbon nanotubes were used. The analysis of maps of electrostatic potentials and charge distributions in the considered systems has made it possible to explain the mechanism of interaction between the components of polymer composites for the selected polymer and nanotubes. Next, the electron-energy structure of the obtained polymer nanocomposites has been analyzed. Based on the data obtained, a conclusion has been made about the conductive properties of the resulting complex. **Conclusion:** The results obtained demonstrate the prospects of using carbon nanotubes for targeted modification of the electrophysical properties of polymer matrices and the creation of functional nanocomposite materials with specified conductive characteristics.

Keywords: polyvinylpyrrolidone, single- and double-walled carbon nanotubes, method of Density Functional Theory (DFT), adsorption interaction, electron-energy structure, polymer nanocomposites, conductive properties

Acknowledgments: The work was carried out within the framework of the State assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. "FZUU-2023-0001").

For citation: Elbakyan L. S., Zaporotskova I. V. Investigation of the conductive properties of composite polymer materials based on polyvinylpyrrolidone doped with single and double-walled nanotubes. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 495–504 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-495-504>, EDN: XKDYPG

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

Развитие нанотехнологий требует совершенствования методов компьютерного моделирования, так как экспериментальное изучение наночастиц и кластеров часто сопряжено с техническими сложностями и высокой стоимостью. Современные вычислительные подходы позволяют предсказывать их свойства, структуру и динамику с высокой точностью, что ускоряет разработку новых материалов и технологий. Совершенствование алгоритмов и рост вычислительных мощностей (включая квантовые вычисления) открывают новые возможности для точного предсказания поведения наночастиц, что критически важно для нанотехнологий будущего.

Полимеры с регулируемой электропроводностью и термочувствительностью очень востребованы в различных областях применения. Знание электрических свойств тонких полимерных пленок на низких частотах полезно при изучении материалов и определении характеристик для изготовления устройств [1, 2]. Например, тонкие изоляционные пленки широко используются в интегральных схемах.

Разработка полимерных систем, обладающих проводящими свойствами, является одной из основных задач в исследованиях полимеров [3–7]. Это объясняется их потенциальным применением в качестве электролитов в твердотельных батареях, топливных элементах, электрохимических дисплеях, «умных окнах», фотоэлектрохимических элементах и т. д., благодаря их высокой проводимости, плотности энергии, электрохимической стабильности и простоте обработки. В последние годы ученые всего мира

активно работают над созданием твердых полимерных электролитов. Это связано с их потенциальным применением в качестве электролитических материалов в аккумуляторах с высокой плотностью энергии, перезаряжаемых батареях и твердотельных аккумуляторах. Кроме того, гибкие носимые электронные устройства получили широкое внимание в областях мониторинга здоровья человека, биоэлектронных интерфейсов и взаимодействия человека с компьютером. Проводящие гидрогели постепенно стали лучшими материалами-кандидатами для гибких носимых электронных устройств из-за их хороших проводящих свойств, модуля упругости, аналогичного естественной кожной ткани, и регулируемых механических свойств. Приготовление гидрогеля может быть выполнено с использованием как натурального, так и синтетического полимера.

1. Материалы и методы

В данной работе для исследования особенностей структуры, механизмов взаимодействия, а также электронно-энергетического строения нанокompозита на основе поливинилпирролидона, допированного углеродными нанотрубками применен квантово-химический метод теории функционала плотности [8–13]. 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 B3LYP. Главным достоинством метода B3LYP является его высокая точность [14]. Данный функционал хорошо адаптирован под выбранные



системы. Расчеты велись с применением валентно-расщепленного базисного набора типа 3-21G. Оптимальный базис был выбран на основе серии тестовых расчетов с различными базисами и последующего анализа их воздействия на конечные результаты, что отражено в представленном исследовании.

Среди синтетических полимеров поливинилпирролидон (ПВП) является аморфным и существует в виде произвольно свернутой и очень гибкой цепочки в полярных растворителях. Эти водорастворимые полимеры имеют широкий спектр биологических, фармацевтических и технологических применений. ПВП является полярным полимером благодаря своей карбонильной группе с двойной связью в пирролидоновом кольце [15]. Сетчатая структура ПВП имеет различную длину π - и σ -связей между атомами азота, кислорода, углерода и водорода (рис. 1).

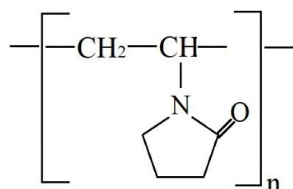
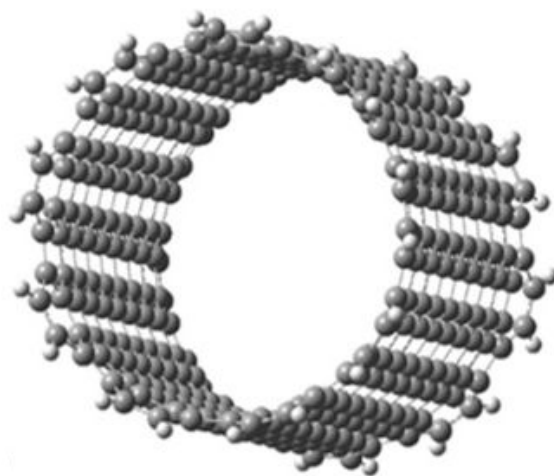


Рис. 1. Структурная формула полимера поливинилпирролидона

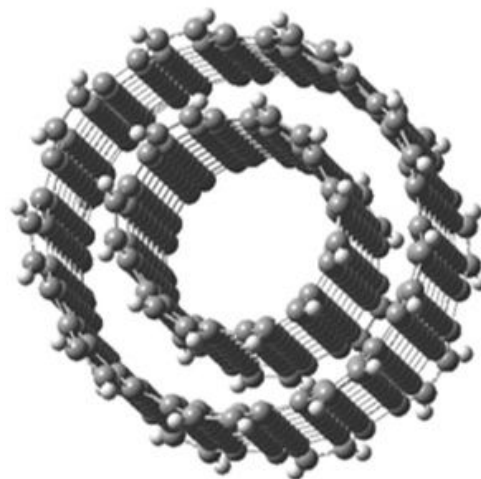
Fig. 1. Structural formula of polyvinylpyrrolidone polymer

Несмотря на широкое применение ПВП, у этого полимера есть ряд недостатков, которые ограничивают его использование в некоторых областях. Одним из основных недостатков поливинилпирролидона является низкая механическая прочность, что делает пленки на основе ПВП хрупкими и требует различные наполнители. Кроме того, данный полимер при высоких температурах (свыше 150°C) может разлагаться, что также ограничивает его применение в промышленных целях. Для минимизации негативных эффектов часто используют модифицированные формы ПВП или комбинируют его с другими наполнителями и полимерами [16–17]. В качестве нанодобавки предложено использование углеродных нанотрубок.

Нами проведены детальные теоретические исследования, а именно взаимодействие рассматриваемого полимерного материала с углеродными нанотрубками (УНТ) разной слойности. Рассмотрены однослойные углеродные нанотрубки типа (9,9) и двуслойные углеродные нанотрубки, состоящие из двух нанотрубуленов типа (6,6) и (9,9) (рис. 2) [18–20].



a/a



b/b

Рис. 2. Однослойные углеродные нанотрубки типа (9,9) (а); двуслойные углеродные нанотрубки, состоящие из нанотрубуленов типа (6,6) и (9,9) (б)

Fig. 2. Single-walled carbon nanotubes of type (9,9) (a); double-walled carbon nanotubes consisting of nanotubulenes of type (6,6) and (9,9) (b)

2. Результаты и их обсуждение

2.1. Выбор оптимального базисного набора

Подбор наиболее подходящего базисного набора в DFT-расчетах определяется несколькими ключевыми моментами, включая цели исследования, масштаб системы, природу химических взаимодействий, доступные вычислительные мощности и дополнительные условия. Для протяженных систем, обладающих большим числом молекул (например, белки и ДНК, наночастицы, кристаллические и аморфные материалы и т. д.) ключевой задачей становится поиск разумного компромисса между точностью моделирования и приемлемым временем расчетов.



Следовательно, оптимальный базисный набор выбирается с учетом баланса между допустимыми упрощениями и снижением вычислительной нагрузки [21, 22]¹.

Нами проведена серия тестовых расчетов с разными базисными наборами и проанализировали их влияние на итоговые результаты. Чтобы определить оптимальный базисный набор для квантово-химического моделирования адсорбционного взаимодействия в системах, включающих одно- и двухслойные углеродные нанотрубки и фрагмент поливинилпирролидона, а также для изучения их электронной структуры, были выполнены следующие этапы с использованием основных базисов:

- оптимизация геометрии мономера винилпирролидона (получены равновесные длины связей и проведено их сравнение с литературными данными [23, 24]);
- расчет средней энергии связи в исследуемой молекуле;
- расчет энергии, геометрии и ширины запрещенной зоны углеродных нанотрубок (сравнение с литературными данными);
- оценка вычислительных затрат (общего времени расчета для каждого базисного набора).

Результаты первого этапа вычислений – расчет длин межатомных связей в молекуле винилпирролидона приведены в табл. 1.

Полученные данные о длинах межатомных связей, рассчитанных в представленных базисах, достаточно близки к справочным данным. При этом наиболее точно межатомные расстоя-

ния описываются с помощью базисных наборов Попла, а именно 3-21G и 6-31G с добавлением поляризационных (либо и поляризационных, и диффузных) функций.

При различных базисных наборах Попла 3-21G, 6-31G, 6-31G(d,p), 6-31G++(d,p) была также рассчитана средняя энергия связи для рассматриваемых фрагментов, которая определялась как

$$E_{\text{св}} = \frac{E_{\text{полн}} - (a \cdot E(\text{O}) + b \cdot E(\text{H}) + c \cdot E(\text{O}) + d \cdot E(\text{N}))}{N_{\text{ат}}},$$

где $E_{\text{полн}}$ – энергия системы; $E(\text{C})$, $E(\text{H})$, $E(\text{O})$, $E(\text{N})$ – энергии изолированных атомов, содержащихся в комплексе; a , b , c , d – количество этих атомов; $N_{\text{ат}}$ – общее число атомов в комплексе. Значения энергии связи атомов ПВП в зависимости от используемого базисного набора представлены в табл. 2. Сравнение результатов вычисления показал их приемлемое согласие для выбранных базисов.

Далее нами были определены геометрические параметры и значения ширины запрещенной зоны углеродных нанотрубок при использовании базисов 3-21G, 6-31G, 6-311G, 6-31G(d,p), 6-31++ G(d,p) и cc-pVDZ. В качестве объекта исследования выбрана нанотрубка типа (6,6). Результаты показали, что применение различных базисных наборов не приводит к существенному различию в рассчитанной длине связей между углеродными атомами в гексагональной структуре УНТ и остается порядка 1.42 Å, что соответствует литературным данным. Кроме того,

Таблица 1 / Table 1

Длина межатомных связей в мономере винилпирролидон, Å
The length of interatomic bonds in the vinylpyrrolidone monomer, Å

Тип соединения / Type of connection	Длина связи / The bond length				
	C=C	C=O	C-N	C-H (R-CH2-R)	C-H (аромат. соедин.) / C-H (arom. conn.)
3-21G	1.333	1.245	1.466	1.083	1.084
6-31G	1.339	1.256	1.450	1.084	1.084
6-311G	1.335	1.255	1.450	1.080	1.076
6-31G(d,p)	1.340	1.225	1.451	1.084	1.080
6-31++ G	1.341	1.257	1.448	1.084	1.079
6-31++G (d,p)	1.338	1.230	1.443	1.084	1.080
cc-pVDZ	1.338	1.226	1.446	1.090	1.087
Справочные данные / Background information	1.335	1.215	1.479	1.083	1.084

¹См. также: Николаева Е. В., Храповский Г. М., Шапов А. Г. Способы задания геометрии химических соединений для программы Gaussian : учебное пособие. Казань : Издательство Казанского национального исследовательского технологического университета, 2013. 93 с. URL: <https://www.kstu.ru/servlet/contentblob?id=69677> (дата обращения: 24.09.2025).



Таблица 2 / Table 2

Значения энергии связи атомов в полимере ПВП в зависимости от используемого базисного набора
Values of the binding energy of atoms in the PVP polymer, depending on the basic set used

Базисный набор / Basic set	Средняя энергия связи атомов в ПВП, эВ / The average binding energy of atoms in PVP, eV
3-21G	-5.863
6-31G	-5.814
6-31G(d, p)	-5.999
6-31++G(d,p)	-5.880

расчет ширины запрещенной зоны для нанотрубок типа (6,6) при разных базисах не обнаружил существенных различий в получаемых значениях (табл. 3).

Таблица 3 / Table 3

Результаты расчета ширины запрещенной зоны УНТ (6,6) с помощью различных базисных наборов
Results of calculating the width of the CNT (6,6) band gap using various basic sets

Базисный набор / Basic set	Ширина запрещенной зоны УНТ (6,6) E_g , эВ / The CNT(6,6) band gap E_g , eV
3-21G	0.965
6-31G	0.952
6-31G(d,p)	0.969
6-31++G	0.969
6-31++G (d,p)	0.969
6-311G	0.954
сс-pVDZ	0.971

Проведенные DFT-расчеты с использованием базисов 3-21G, 6-31G, 6-31G(d,p)

или 6-31G++(d,p) дали результаты, близкие к экспериментальным данным. Однако при исследовании крупных молекулярных систем, включающих фрагменты полимеров и одно- или двухслойные углеродные нанотрубки, наименьшие вычислительные затраты обеспечивает базис 3-21G.

Таким образом, для масштабных расчетов рекомендуется использование базиса 3-21G как наиболее сбалансированного по соотношению точности и вычислительной эффективности.

2.2. Анализ карт электростатического потенциала

При создании комплекса «ПВП+УНТ» важно правильно определить наиболее реакционноспособный центр полимера, способный обеспечить прочное связывание с поверхностью нанотрубок. Как известно, электростатический потенциал играет ключевую роль в исследовании межмолекулярных взаимодействий, предсказании реакционных центров, оценке молекулярных свойств и т. д.

В ходе исследования нами были проанализированы карты электростатического потенциала и распределение зарядов в изучаемых системах. При молекулярном моделировании расчет электростатического потенциала на молекулярной поверхности обычно выполняется на основе распределения электронной плотности, выявленного в результате квантово-химических расчетов. Такой подход позволяет наглядно оценить электростатические характеристики молекулы, что

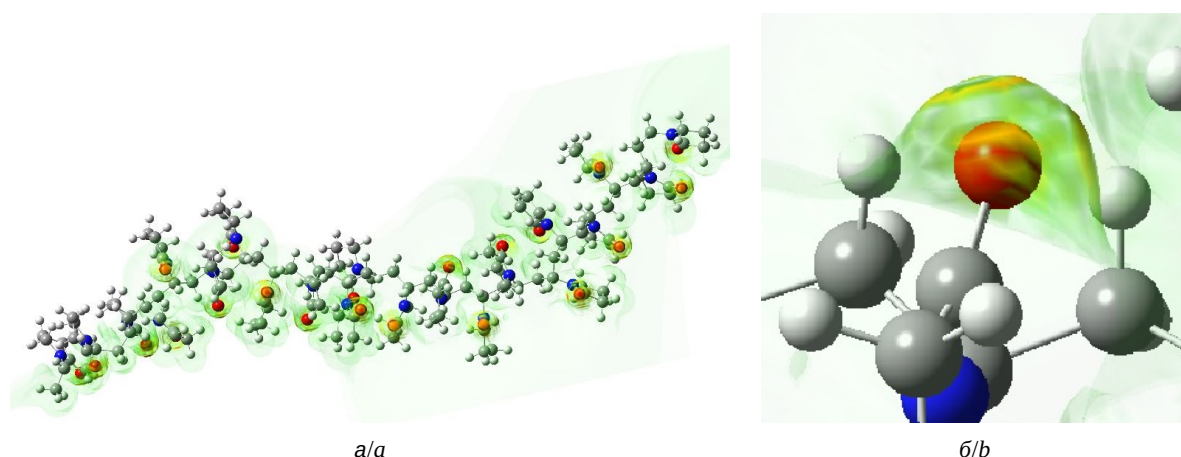


Рис. 3. Карта электростатического потенциала: фрагмент карты для поливинилпирролидона (а); фрагмент карты окрестности атома кислорода (положительный потенциал), вокруг атома – высокая электронная плотность (отрицательный потенциал) (б) (цвет онлайн)

Fig. 3. A color-coded map of the electrostatic potential: a fragment of polyvinylpyrrolidone (a); an enlarged image of an oxygen atom (red), around which a high electron density is concentrated (negative potential)) (b) (color online)



имеет решающее значение для прогнозирования ее взаимодействий с другими соединениями, растворимости и химической активности. На рис. 3 визуализировано электростатическое поле фрагмента $[C_6H_9ON]_{15}$ в виде цветовой кодировки. Видно, что вблизи атома кислорода (красный цвет) сосредоточена высокая электронная плотность (зеленый цвет). Это говорит о том, что данный атом является реакционным центром ПВП.

2. 3. Исследования взаимодействия поливинилпирролидона с углеродными нанотрубками

Для изучения влияния слойности УНТ на процесс адсорбционного взаимодействия системы «ПВП+УНТ» были выбраны однослойные углеродные нанотрубки типа (9,9) и двуслойные углеродные нанотрубки, состоящие из внутренней трубки типа (6,6) и внешней типа (9,9). Выбранные УНТ относятся к хиральным видам (arm-chair) нанотрубок и выбраны с учетом частого их применения (типичных диаметров). Так, УНТ (6,6) с диаметром $\sim 0,81$ нм считается одной из самых узких стабильных нанотрубок типа arm-chair и подходит для изучения квантовых эффектов и наноэлектроники, а УНТ(9,9)

(с диаметром $\sim 1,22$ нм) представляет более широкие нанотрубки, но остаётся в диапазоне, где сохраняются уникальные механические и электронные свойства. Также известно, что диаметр УНТ $\sim 1-2$ нм – типичный диапазон для многих экспериментов. Таким образом, можно предположить, что УНТ (6,6) и (9,9) покрывают ключевые точки в диапазоне диаметров, важных для исследований.

При моделировании в качестве объекта исследования использовали фрагмент полимера ПВП, содержащего 15 мономерных звеньев винилпирролидона $[C_6H_9ON]_{15}$. На основании проведенного анализа карт электростатического потенциала был выбран наиболее реакционно-способный центр, который способен обеспечить стабильную связь исследуемого фрагмента с поверхностью нанотрубок – атом кислорода, находящийся преимущественно в центре выделенного фрагмента. Моделирование адсорбционного взаимодействия проводили путем последовательного приближения ПВП (с шагом 0.1 \AA) к определенному атому углерода на поверхности УНТ, находящемуся в центральной части кластера (в перпендикулярном направлении). На рис. 4 представлены полученные энергетические кривые, описывающие процесс адсорбционного вза-

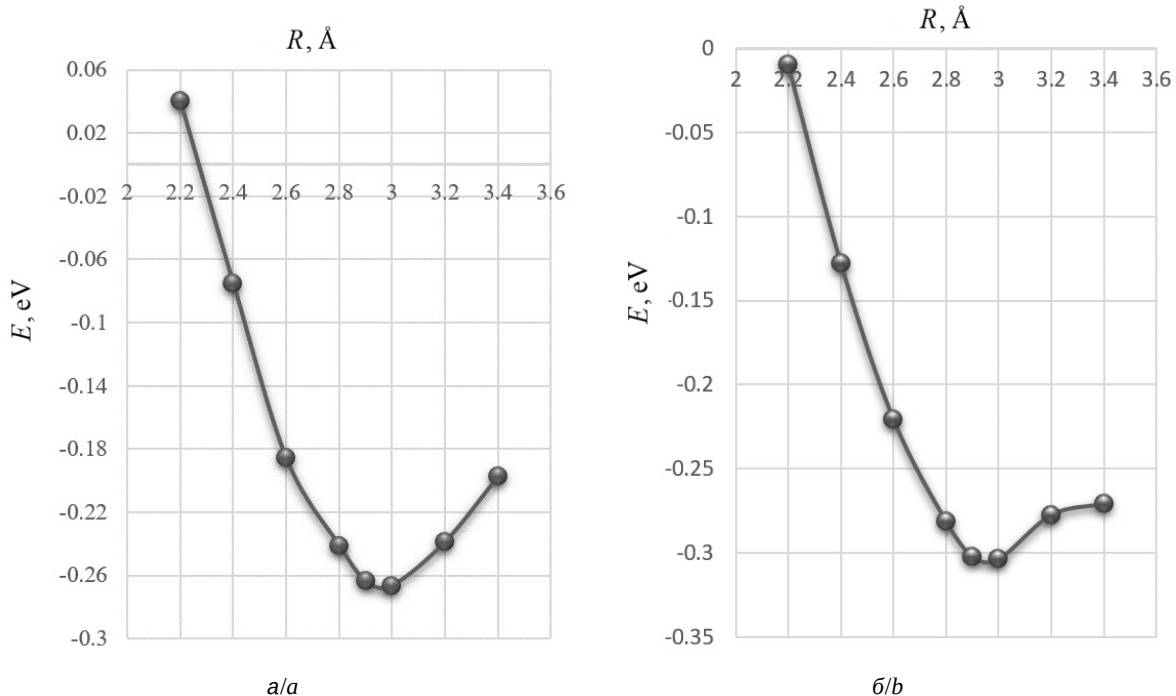


Рис. 4. Профили поверхности потенциальной энергии процесса взаимодействия фрагмента поливинилпирролидона в координатах расстояние R – энергия E : с однослойной УНТ (а), с двуслойной УНТ (б)

Fig. 4. Profiles of the potential energy surface of the polyvinylpyrrolidone fragment interaction process in distance R – energy E coordinates: with single-walled CNT (a), double-walled CNT (b)



имодействия фрагмента поливинилпирролидона $[C_6H_9NO]_{15}$ с однослойной УНТ типа (9,9) и двухслойной УНТ с внутренней трубкой (6,6) и внешней (9,9).

Проведенный анализ энергетических кривых показал, что адсорбционное взаимодействие фрагмента полимера ПВП с одно- и двухслойными УНТ с энергетической точки зрения не выявило предпочтений: значение энергии адсорбции фрагмента на поверхности однослойной УНТ составило 0.27 эВ, на поверхности двухслойной УНТ – 0.30 эВ, которые реализуются на расстоянии 3.0 Å. Этот результат позволяет сделать вывод о незначительном влиянии количества слоев в углеродной нанотрубке на формирование композитной системы «ПВП+УНТ». Теоретические расчеты позволяют говорить о физической природе адсорбционного процесса за счёт сил Ван-дер-Ваальса, являющегося обратимым. При этом, согласно литературным, требуемая энергия активации для физической адсорбции происходит на больших расстояниях за счёт слабых взаимодействий до 80 кДж/моль (~ 0.83 эВ) [25]².

Результаты квантово-химического анализа электростатических потенциалов и распределения атомных зарядов свидетельствуют о некой перестройке электронной структуры при формировании комплекса углеродной нанотрубки с фрагментом ПВП. Так, заряд атомов углеро-

да изолированной нанотрубки близок к нулевому значению (рис. 5, а), в то время как при взаимодействии с фрагментом ПВП *средний* заряд атомов углерода в области контакта составляет +0.043, а на атоме кислорода (реакционном центре) полимера достигает -0.517 (происходит перераспределение электронной плотности, рис. 5, б).

Полученные данные свидетельствуют о возникновении дополнительного кулоновского взаимодействия между углеродной нанотрубкой и полимерным фрагментом.

2.4. Анализ электронно-энергетического строения комплексов, образованных одно- / двухслойными УНТ и фрагментом ПВП

Исследование электронно-энергетического строения комплексов, образованных однослойными и двухслойными углеродными нанотрубками с фрагментом поливинилпирролидона, представляет значительный интерес для нанoeлектроники, управления проводимостью новых материалов. В работе рассмотрен фрагмент ПВП, состоящий из 15 структурных единиц – $[C_6H_9NO]_{15}$. Анализ ширины запрещенной щели ΔE_g комплексов, рассчитанной как разность энергий верхней заполненной $E_{ВЗМО}$ и нижней вакантной $E_{НВМО}$ молекулярных орбиталей, показало, что эти системы по типу

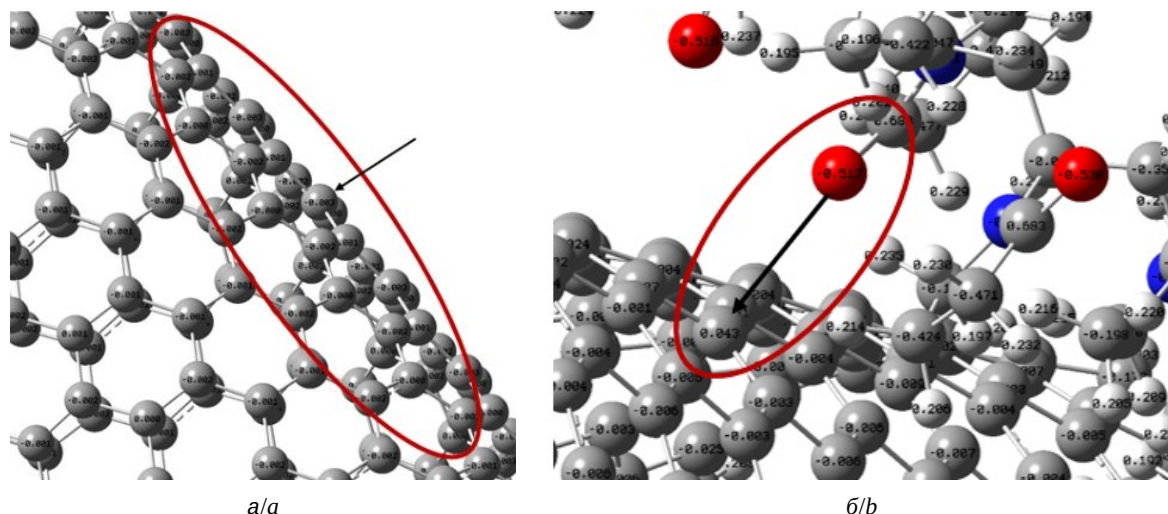


Рис. 5. Зарядовое распределение атомов: на поверхности изолированной УНТ (а); при взаимодействии УНТ с фрагментом ПВП (б)

Fig. 5. Charge distribution of atoms: on the surface of an isolated unit (a); during the interaction of the CNT with a PVP fragment (b)

²См. также: Лебедева М. В., Дулина О. А., Свитов В. И., Яштулов Н. А. Физико-химические особенности адсорбционных процессов в нанотехнологии : учебно-методическое пособие. М. : Мир науки, 2021. 46 с. URL: <https://izd-mn.com/PDF/46MNNPU21.pdf>



проводимости представляют собой полупроводники. При этом установлено, что величина ΔE_g для комплекса « $[C_6H_9NO]_{15}$ – УНТ» с однослойными УНТ составляет 0.42 эВ, а для системы с двухслойными УНТ – 0.36 эВ.

Полученные результаты демонстрируют, что включение углеродных нанотрубок в диэлектрическую матрицу ПВП приводит к формированию композитных материалов с полупроводниковыми характеристиками. На рис. 6 представлено схематическое отображение структуры одноэлектронных энергетических уровней для молекулярных орбиталей рассматриваемых систем – изолированных УНТ, ПВП и комплекса «ПВП+УНТ». Они отмечены синим, красным и зеленым цветами соответственно. Незаполненным молекулярным орбиталям отвечает черный цвет. Указаны энергетические характеристики для граничных орбиталей – высшей, занятой, молекулярной орбитали (ВЗМО) и низшей, свободной (вакантной), молекулярной орбитали (НСМО) для каждой структуры. В нижней части графического

изображения представлена разность ΔE_g между значениями ВЗМО и НСМО. Эти данные можно использовать для прогнозирования прочности и стабильности, а также проводящих свойств молекулярных комплексов.

Полученные теоретические результаты хорошо согласуются с результатами экспериментальных и теоретических работ, связанных с определением значений ширины запрещенной зоны углеродных нанотрубок [26]. Фундаментальная ширина запрещенной зоны в типичных полупроводниковых нанотрубках составляет от 0.4 эВ до 0.7 эВ³.

Таким образом, выполненные нами DFT-расчеты доказали, что взаимодействие нанотрубок с фрагментами полимера ПВП происходит как за счет ван-дер-ваальсовских сил, так и благодаря кулоновским взаимодействиям, обусловленным перераспределением электронной плотности при образовании комплекса. Эта информация важна для прогнозирования перспектив создания стабильного комплекса на основе поливинил-

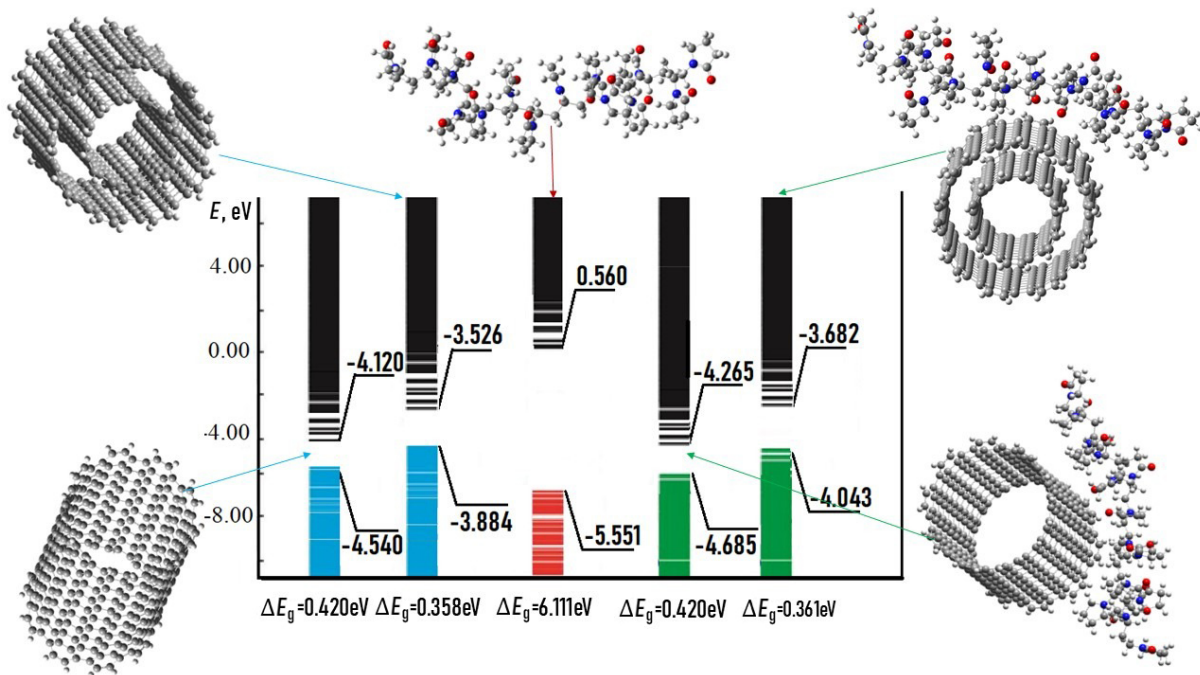


Рис. 6. Визуализация одноэлектронных энергетических спектров: одно- и двухслойных УНТ, кластеров изолированного фрагмента ПВП, систем «ПВП+УНТ». Приведены значения для ВЗМО и НСМО, ширина запрещенной зоны ΔE_g (цвет онлайн)

Fig. 6. Visualization of single-electron energy spectra of single- and double-walled CNTs, clusters of an isolated PVP fragment and CNT + PVP systems with indication of the values for the highest occupied molecular orbital (HOMO), the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) and also band gap (ΔE_g) (color online)

³См.: Рембеза С. И., Рембеза Е. С., Кошелева Н. Н. Низкоразмерные структуры для микро- и наноэлектроники : учебное пособие. Воронеж : Воронежский государственный технический университет, 2015. С. 64. URL: https://cchgeu.ru/upload/iblock/9e5/j1wjegia2han78uwonujrq4ep9bgor3w/04_UP_2015_Rembeza_Nizkorazmernye-struktury.pdf (дата обращения: 24.09.2025).



пирролидона, допированного углеродными нанотрубками различной слоистости.

Выводы

Проведенное моделирование нанокомпозитных систем «ПВП+УНТ» позволило выявить существенное влияние углеродных нанотрубок на проводящие свойства исследуемых систем. Установлено, что углеродные нанотрубки, вводимые в диэлектрическую полимерную матрицу поливинилпирролидона, приводят к изменению электронно-энергетического строения создаваемых нанокомпозитных комплексов и появлению полупроводящего состояния полимерного композитного материала.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования углеродных нанотрубок для целенаправленного модифицирования электрофизических свойств полимерных матриц и создания функциональных нанокомпозитных материалов с заданными проводящими характеристиками.

Список литературы / References

- Green M. J., Bhabtu N., Pasquali M., Adams W. W. Nanotubes as polymers. *Polymer*, 2009, vol. 50, iss. 21, pp. 4979–4997. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2009.07.044>
- Ribeiro B., Botelho E. C., Costa M. L., Bandeira C. F. Carbon nanotube buckypaper reinforced polymer composites: A review. *Polímeros*, 2017, vol. 27, no. 3, pp. 247–255. <https://doi.org/10.1590/0104-1428.03916>
- Jorio A., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Carbon Nanotubes: Advanced topics in the synthesis, structure, properties and applications. Berlin, Springer, 2008. XXIV, 720 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-72865-8>
- Liu Y., Kumar S. Polymer/carbon nanotube nano composite fibers – A review. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2014, vol. 6, iss. 9, pp. 6069–6087. <https://doi.org/10.1021/am405136s>
- Alamry A., Rahimian S. S. K., Abdullah A. H., Arockiarajan A. Carbon nanotube characteristics and enhancement effects on the mechanical features of polymer-based materials and structures – A review. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, vol. 24, no. 5, pp. 6495–6521. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.04.072>
- Elbakyan L. S., Zaporotskova I. V. Composite nanomaterials based on polymethylmethacrylate doped with carbon nanotubes and nanoparticles: A review. *Polymers*, 2024, vol. 16, no. 9, art. 1242. <https://doi.org/10.3390/polym16091242>
- Elbakyan L. S., Zaporotskova I. V. Polypropylene modified with carbon nanomaterials: Structure, properties and application possibilities (A review). *Polymers*, 2025, vol. 17, no. 4, art. 517. <https://doi.org/10.3390/polym17040517>
- Spitalsky Z., Tasis D., Papagelis K., Galiotis C. Carbon nanotube–polymer composites: Chemistry, processing, mechanical and electrical. *Progress in Polymer Science*, 2010, vol. 35, iss. 3, pp. 357–401. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2009.09.003>
- Fuchs M., Scheffler M. *Ab initio* pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density-functional theory. *Comp. Phys. Commun.*, 1999, vol. 119, pp. 67–98. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(98\)00201-X](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(98)00201-X)
- Beckstedt M., Kley A., Neugebauer J., Scheffler M. Density functional theory calculations for poly-atomic systems: Electronic structure, static and elastic properties and *ab initio* molecular dynamics. *Comp. Phys. Commun.*, 1997, vol. 107, pp. 187–205. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(97\)00117-3](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(97)00117-3)
- Perdew J. P., Zunger A. Self-interaction correction to density functional approximation for many-electron systems. *Phys. Rev. B*, 1981, vol. 23, no. 10, pp. 5048–5079. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.5048>
- Becke A. D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Phys. Rev. A*, 1988, vol. 38, no. 6, pp. 3098–3100. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.3098>
- Reiher M., Salomon O., Hess B. A. Reparameterization of hybrid functionals based on energy differences of states of different multiplicity. *Theor. Chem. Acc.*, 2001, vol. 107, iss. 1, pp. 48–55. <https://doi.org/10.1007/s00214-001-0300-3>
- Koch W., Holthausen M. C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. 2nd ed. Weinheim, New York, Wiley-VCH, 2001. XIII, 300 p. <https://doi.org/10.1002/3527600043>
- Elbakyan L. S., Hayrapetyan D. B., Mantashyan P. A. DFT study of GaAs quantum dot and 5CB liquid crystal molecule interaction. *J. of Molecular Graphics and Modelling*, 2025, vol. 136, art.108953. <https://doi.org/10.1016/j.jmgs.2025.108953>
- Ichkitidze L. P., Popovich K. D., Suchkova V. V., Ryabkin D. I., Petukhov V. A., Telyshev D. V., Selishchev S. V., Gerasimenko A. Yu. Flexible electrically conductive films based on biocompatible composite material. *Technical Physics*, 2025, vol. 95, iss. 3, pp. 643–652. <https://doi.org/10.61011/JTF.2025.03.59872.285-24> (in Russian).
- Malka E., Margel S. Engineering of PVA/PVP hydrogels for agricultural applications. *Gels*, 2023, vol. 9, iss. 11, art. 895. <https://doi.org/10.3390/gels9110895>
- Gökmeşe F., Uslu İ., Aytimur A. Preparation and characterization of PVA/PVP nanofibers as promising materials for wound dressing. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 2013, vol. 52, iss. 12, pp. 1259–1265. <https://doi.org/10.1080/03602559.2013.814144>
- Pople J. A. Nobel Lecture: Quantum chemical models. *Reviews of Modern Physics*, 1999, vol. 71, iss. 5, pp. 1267–1274. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.1267>



20. Electronic motion: Density functional theory (DFT). In: Piela L. *Ideas of quantum chemistry*. Amsterdam, Elsevier, 2007, ch. 11, pp. 567–614. <https://doi.org/10.1016/b978-044452227-6/50012-0>
21. Crisostomo S., Pederson R., Kozłowski J., Kalita B., Cancio A. C., Datchev K., Wasserman A., Song S., Burke K. Seven useful questions in density functional theory. *Letters in Mathematical Physics*, 2023, vol. 113, no. 2, art. 42. <https://doi.org/10.1007/s11005-023-01665-z>
22. Ghaffoori A. J., Abdul-Adheem W. R. A review of carbon nanotubes electrical properties for future nanotechnology applications. *J. of AL-Rafidain University College for Sciences*, 2019, vol. 45, iss. 2, pp. 207–222. <https://doi.org/10.55562/jrucsc.v45i2.123>
23. David R. L. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. Boca Raton, CRC Press, 2005, pp. 9-24–9-41.
24. Baron Ya. M., Ponomareva A. M., Ravdel A. A., Timofeeva Z. N. *Kratkii spravochnik fiziko-khimicheskikh velichin* [Ravdel A. A., Ponomareva A. M., eds. Brief reference book of physical and chemical quantities]. St. Petersburg, Ivan Fedorov Publ., 2003. 240 p. (in Russian).
25. Adamson A. W. *Physical Chemistry of Surfaces*. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1976. 728 p. (Russ. ed.: Moscow, Mir, 1979. 568 p.).
26. Miao R., Liang Y., Zhou G., Deng Y., Wang L., Deng J., Shao Q. Single walled carbon nanotubes band gap width measurement and the influence of nitrogen doping research. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2024, vol. 26, iss. 3, pp. 1616–1624. <https://doi.org/10.1039/d3cp05332f>

Поступила в редакцию 25.06.2025; одобрена после рецензирования 10.07.2025; принята к публикации 10.09.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 25.06.2025; approved after reviewing 10.07.2025; accepted for publication 10.09.2025; published 28.11.2025