

Л.А. БУЛАВІН,¹ М.А. АЛЕКСАНДРОВ,¹ А.І. МІСЮРА,¹ Т.М. ПІНЧУК-РУГАЛЬ,¹
А.П. ОНАНКО,¹ Ю.Є. ГРАБОВСЬКИЙ,¹ О.П. ДМИТРЕНКО,¹ М.П. КУЛІШ,¹
О.Л. ПАВЛЕНКО,¹ Т.О. БУСКО,¹ І.П. ПУНДИК,¹ А.І. ЛЕСЮК,¹ В.В. СТРЕЛЬЧУК²

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка

(Вул. Володимирська, 64, Київ 01033; e-mail: mtarafon@gmail.com)

² Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
(Просп. Науки, 41, Київ 03028)

МЕХАНІЗМИ ПЕРЕТВОРЕНЬ СТРУКТУРИ В НАНОКОМПОЗИТАХ ПОЛІЕТИЛЕНУ З БАГАТОСТІННИМИ ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОТРУБКАМИ

УДК 539

Досліджено динамічні модулі пружності, зсуву в нанокompозитах поліетилену низької густини з багатостінними вуглецевими нанотрубками (ПЕНГ-БВНТ). Показано, що поведінка динамічного модуля пружності Юнга E' та модуля зсуву G' при збільшенні концентрації нанотрубок має немонотонний характер. Зі збільшенням вмісту БВНТ важливу роль відіграє орієнтаційна структурованість макромолекул, адсорбованих на нанотрубках. Це супроводжується перебудовою коливних спектрів та електронної структури і, як наслідок, може впливати на покращення фізико-механічних та транспортних властивостей вказаних нанокompозитів.

Ключові слова: нанокompозити, динамічні модулі пружності, зсуву, фізико-механічні властивості.

1. Вступ

Будова та геометрія приводить до ряду унікальних механічних, сорбційних, теплопровідних, транспортних властивостей вуглецевих нанотрубок (ВНТ) [1–5], які дозволяють розглядати їх одними з найбільш досконалих наповнювачів полімерних нанокompозитів. Використання ВНТ в полімерних матрицях супроводжується можливістю отримання наднизьких значень порога перколяції електропровідності [6–8], істотного покращення механічних властивостей [9]. Таке покращення

реалізується внаслідок взаємодії полімерних макроланцюгів з нанотрубками і формування на ВНТ іммобілізованих шарів [10–12]. Водночас вказані шари з орієнтованими макромолекулами можуть характеризуватися різними конфораціями ланцюгів та відповідати різним структурам [14, 15]. Метою даної роботи є встановлення особливостей внутрішньомолекулярної структури в нанокompозитах ПЕНГ-БВНТ та встановлення механізмів концентраційних перетворень динамічних механічних властивостей.

2. Методика експерименту

В роботі використано поліетилен низької густини (ПЕНГ, Україна). Молекулярна вага 80000, температура плавлення 108–110 °С. Синтез вуглецевих нанотрубок здійснювався методом низькотемпературної каталітичної конверсії монооксиду вуглецю.

© Л.А. БУЛАВІН, М.А. АЛЕКСАНДРОВ,
А.І. МІСЮРА, Т.М. ПІНЧУК-РУГАЛЬ,
А.П. ОНАНКО, Ю.Є. ГРАБОВСЬКИЙ,
О.П. ДМИТРЕНКО, М.П. КУЛІШ,
О.Л. ПАВЛЕНКО, Т.О. БУСКО, І.П. ПУНДИК,
А.І. ЛЕСЮК, В.В. СТРЕЛЬЧУК, 2021

гледю в присутності водню. В ролі каталізаторів використовували оксиди заліза. Каталізатором був дрібнодисперсний порошок частинок Fe, яким заповнювався реактор. Температура в реакторі дорівнювала 1000–1300 К. Нанотрубки очищались від домішок шляхом протравлення в розчині $\text{NH}_4\text{F} : \text{HF} : \text{H}_2\text{O} : \text{HCl}$. Діаметр вуглецевих нанотрубок $D = 100$ нм, довжина $l = 1,2$ мкм.

Композити поліетилену з багатостінними вуглецевими нанотрубками були отримані методом гарячого пресування. За допомогою вагів з точністю до 0,0001 г зважувалися компоненти НТ і ПЕНГ, які потім перемішувались у ультразвуковій ванні з теплою водою 60 °С та невеликою кількістю спирту і протягом 5 хв. перемішувалось ультразвуком. Потім, ці склянки залишалися на столі до повного висихання спирту, декілька днів. Висушена суміш повторно була перемішана, але вже вручну, для того щоб вона відстала від стінок склянки і добре висипалася у прес-форму. Після висипання суміші у форму, вона нагрівалася до температури 125–130 °С, температура вимірювалася за допомогою термомпари, закріпленої у спеціальному отворі у прес-формі, після чого ставилася у прес і піддавалася навантаженню у 100 бар (10 МПа) і охолодженню вентилятором. Навантаження і повітряний потік підтримується сталим протягом усього процесу охолодження до кімнатної температури (30 хв.). Отримані композити ПЕНГ-БВНТ мали вигляд дисків діаметром 30 мм та товщиною 1,5 мм. Концентрація нанотрубок у полімерній матриці становила 0–0,030 об. част.

Об'ємна концентрація нанотрубок у полімерній матриці розраховувалася за формулою:

$$\varphi_f = \frac{C_f d_p}{C_f d_p + C_p d_f}, \quad (1)$$

де C_f – масова доля наповнювача, C_p – масова доля полімера, φ_f – об'ємна доля наповнювача, φ_p – об'ємна доля полімера, d_f – густина наповнювача, d_p – густина полімера

Для дослідження механічних властивостей нанокompозитів ПЕНГ-БВНТ використовувався ультразвуковий комп'ютерний вимірювач швидкості КЕРН-4 (Україна).

Динамічний модуль пружності Юнга визначався за формулою:

$$E' = \rho V_1^2, \quad (2)$$

де ρ – густина зразка, V_1 – швидкість квазіпоздовжніх ультразвукових пружних хвиль.

Динамічний модуль зсуву визначався за формулою:

$$G' = \rho V_{tr}^2, \quad (3)$$

де V_{tr} – швидкість квазіпоперечних ультразвукових пружних хвиль.

Похибка вимірювань швидкості становила 1%.

Вимірювання спектрів комбінаційного розсіяння світла (КРС) проводилось в геометрії на відбиття при кімнатній температурі за допомогою потрібного спектрометра Horiba Jobin Yvon T64000 (Японія), оснащеного CCD-детектором, що охолоджується. Спектри збуджувались лінією Ar–Kr іонного лазера з довжиною хвилі $\lambda_L = 488$ нм. Для збудження спектрів фотолюмінесценції використовувались лінії неперервного He–Cd лазера з довжиною хвилі $\lambda_L = 325$ нм і Ar–Kr іонного лазера з довжиною хвилі $\lambda_L = 488$ нм. Роздільна здатність приладу становить $0,015 \text{ см}^{-1}$. Для розкладу спектрів КРС і ФЛ на компоненти використовувалось програмне забезпечення PeakFit v4.11. Контур Gauss+Lor, кількість ітерацій становила $r = 0,998$.

3. Результати та їх обговорення

Концентраційні залежності динамічних модулів пружності Юнга E' , зсуву G' наведено на рис. 1.

Поведінка динамічного модуля пружності Юнга E' при збільшенні концентрації нанотрубок має немонотонний характер. За більшого вмісту БВНТ, важливу роль відіграє орієнтаційна структурованість макромолекул, адсорбованих на нанотрубках. При зростанні концентрації БВНТ, роль вказаних структурованих шарів зростає. Видно, що за малих концентрацій БВНТ динамічний модуль E' різко зростає і в подальшому його збільшене значення зберігається з тенденцією незначного збільшення внаслідок формування орієнтованої структури в розглянутих шарах [9, 10]. Вказана структура в меншій мірі корелює з модулем зсуву G' . Важливу роль в підтриманні збільшеного значення G' в широкому концентраційному інтервалі відіграє орієнтаційна структурованість макромолекул в полімерних прошарках між сусідніми нанотрубками. Оскільки виникнення полімерного прошарку із специфічною структурою є наслідком між-

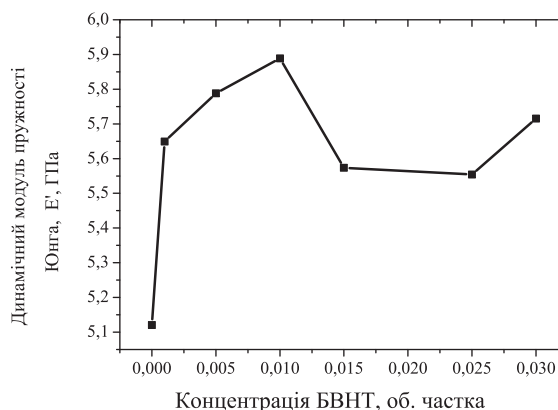
фазної взаємодії, то її наявність має супроводжуватися перебудовою коливних та фотолюмінесцентних спектрів [16–18]. На рис. 2 наведено спектр КРС для поліетилену низької густини (ПЕНГ) з довжиною хвилі збудження $\lambda_{36} = 488$ нм.

Видно, що спектр КРС поліетилену в діапазоні частот 1000–3000 cm^{-1} можна розбити на два: низькочастотний і високочастотний інтервали. Наявні смуги відповідають коливним модам, зумовленим С–С і С–Н зв'язкам в транс-ланцюгах та макромолекулах, які перебувають в кристалічній та аморфній фазах полімеру. Частоти даних смуг вказані на рис. 3.

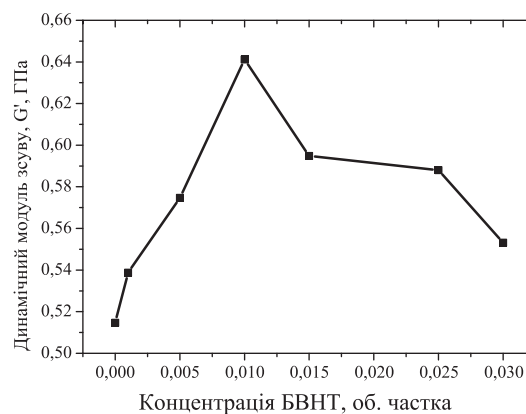
Смуга 1065 cm^{-1} відповідає асиметричним коливанням розтягу зв'язку С–С в скелеті макромолекули v_{as} (С–С) в транс-ланцюгах з типом симетрії $B_{2g} + B_{3g}$. Незначна за інтенсивністю смуга 1082 cm^{-1} відповідає коливанням розтягу зв'язку С–С в аморфній фазі v_{as} (С–С), смугу 1131 cm^{-1} відносять до симетричних коливань розтягу v_s (С–С) в транс-ланцюгах з типом симетрії $A_g + B_{1g}$. Наступна інтенсивна смуга 1298 cm^{-1} відповідає крутильним коливанням v_t (С–С) в кристалічній фазі з типом симетрії $B_{2g} + B_{3g}$. Наступні три смуги 1421 cm^{-1} , 1441 cm^{-1} , 1462 cm^{-1} на відміну від попередніх смуг, які зумовлені коливаннями розтягу або крутильними коливаннями зв'язку С–С в скелеті макромолекули, пов'язані з коливаннями згину (деформаційними коливаннями) та коливаннями качання CH_2 -груп.

Так, смугу 1421 cm^{-1} відносять до деформаційних коливань $\delta(\text{CH}_2)$ і коливань качання $\omega(\text{CH}_2)$ в кристалічній фазі з орторомбічною структурою з типом симетрії A_g . Смуга 1441 cm^{-1} відповідає деформаційним коливанням $\delta(\text{CH}_2)$ в аморфній фазі транс-ланцюгів поліетилену з типом симетрії $A_g + B_{1g}$. Симетричні коливання розтягу $v_s(\text{CH}_2)$ приводять до появи смуги близько 2854 cm^{-1} з типом симетрії $A_g + B_{1g}$, а асиметричні коливання розтягу $v_{as}(\text{CH}_2)$ приводять до появи смуги 2885 cm^{-1} . Інші смуги відносять до прояву Фермі резонансу між фундаментальними коливаннями (2725 cm^{-1}) та до смуг другого порядку спектра (2902 cm^{-1} і 2917 cm^{-1}) або симетричних і асиметричних коливань метальних груп (CH_2), тобто $v_s(\text{CH}_3)$ і $v_{as}(\text{CH}_3)$, відповідно [19–21].

При допуванні поліетилену нанотрубками з 0,001 об. част. смуги змістилися. Так, смуга 1065 cm^{-1} змістилася до 1064 cm^{-1} . Смуга



а



б

Рис. 1. Концентраційні залежності динамічних модулів пружності Юнга (а) та зсуву (б) для нанокompозитів ПЕНГ-БВНТ (частота 1 МГц для E' і 0,7 МГц для G')

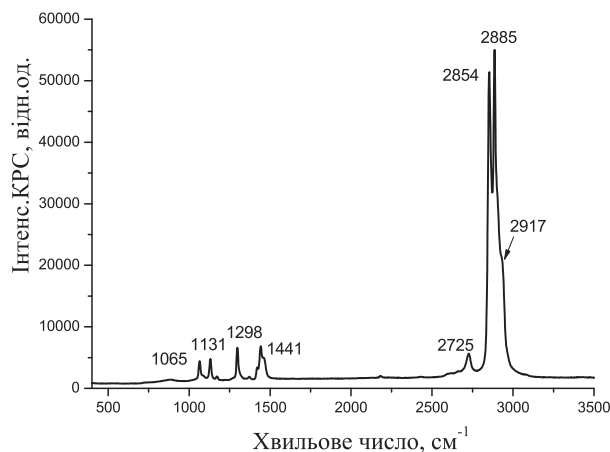


Рис. 2. Спектр КРС поліетилену низької густини ($\lambda_{36} = 488$ нм, $T = 298$ К)

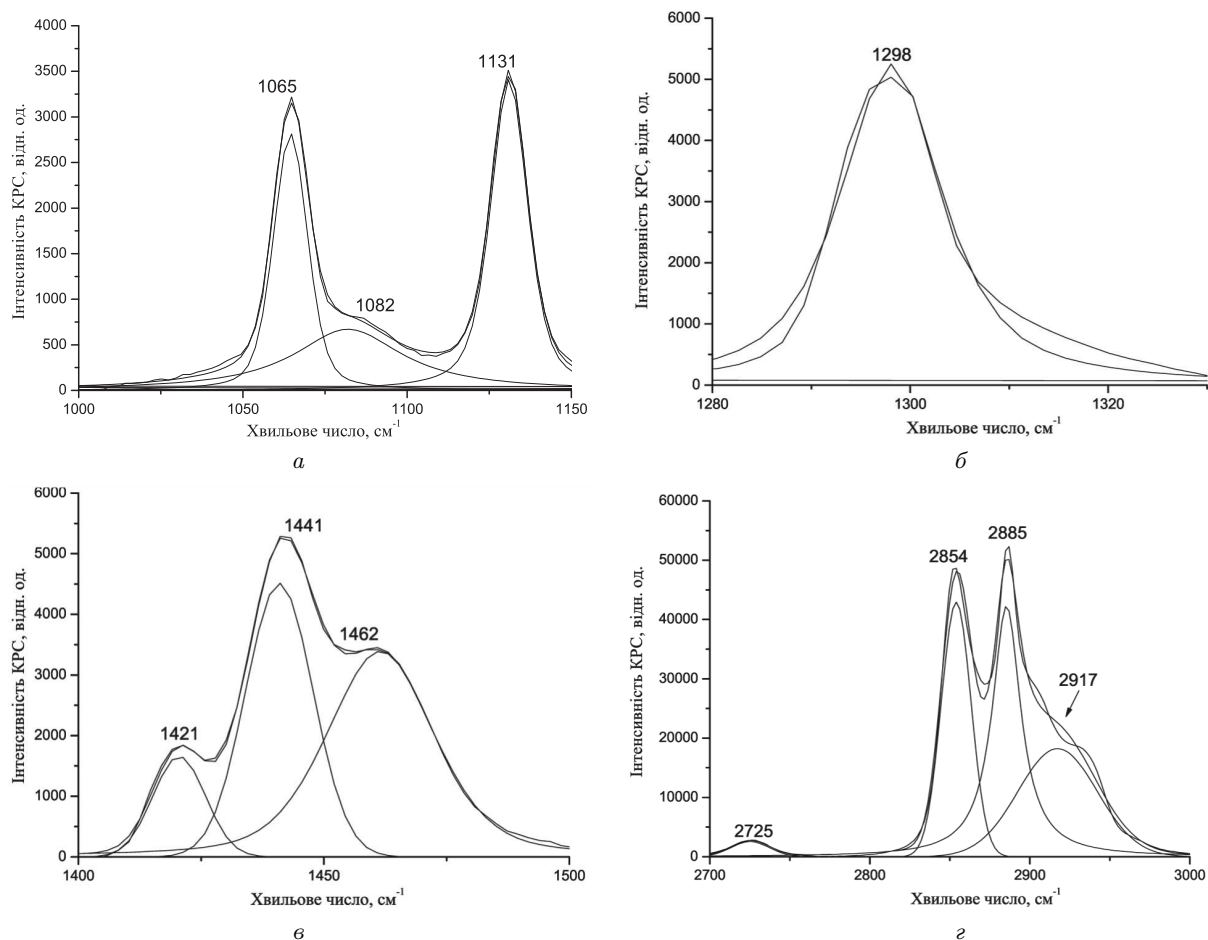


Рис. 3. Спектри КРС поліетилену низької густини в діапазонах хвильового числа 1000–1150 cm^{-1} (а), 1280–1330 cm^{-1} (б) та в діапазонах хвильового числа 1400–1500 cm^{-1} (в), 2700–3000 cm^{-1} (г) та розклад на компоненти ($\lambda_{36} = 488$, $T = 298$ К)

1082 cm^{-1} змістилася до 1086 cm^{-1} . До менших частот від 1462 cm^{-1} до 1455 cm^{-1} змістилася смуга коливної моди $\delta(\text{CH}_2)$. Аналогічно, спостерігається зміщення смуги 2885 cm^{-1} до 2886 cm^{-1} , рис. 4.

Подібна картина перерозподілу інтенсивності в спектрі КРС зберігається з вмісту нанотрубок 0,005 об. част. Істотна перебудова спектра КРС в нанокompозиті ПЕНГ-БВНТ має місце при концентрації нанотрубок 0,03 об. част. Так, з'являється інтенсивна смуга 860 cm^{-1} та менш інтенсивні смуги 130 cm^{-1} і 104 cm^{-1} , що відповідають маятниковим коливанням метиленової групи CH_2 . Крім того, в діапазоні 1500–1600 cm^{-1} з'являються мало інтенсивні смуги, що відповідають присутності БВНТ.

Таким чином, при менших концентраціях нанотрубок вони сприяють зростанню ступеня кристалізації, формуванню транс-конформації макроланцюгів. Із збільшенням вмісту БВНТ, навпаки, має місце аморфізація структури з одночасним збільшенням орієнтованих макромолекул, що перебувають в транс-конформації. Можна стверджувати, що головними механізмами підвищення динамічних модулів пружності та зсуву є формування орієнтованих шарів з транс-конформацією макромолекул за більшого вмісту нанотрубок внаслідок між фазної взаємодії на поверхні наповнювача.

Поліетилен, як і переважна сукупність полімерів, не поглинає світла у видимому діапазоні. Наявність поглинання, флуоресценції, фосфоресценції стає можливою лише в результаті виникнен-

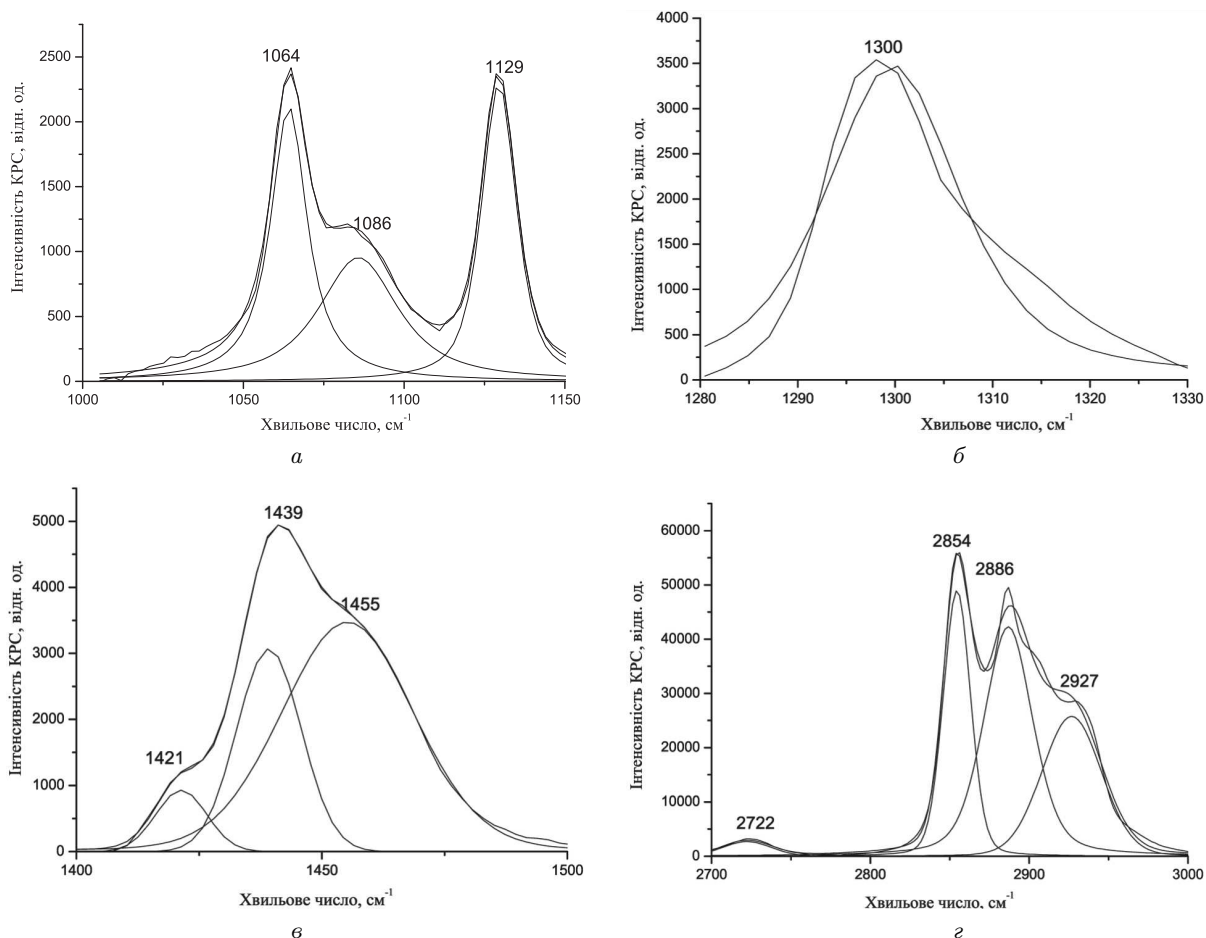


Рис. 4. Спектри КРС нанокompозита ПЕНГ-БВНТ з концентрацією нанотрубок 0,001 об. част. в діапазонах хвильового числа 1000–1150 cm^{-1} (а), 1280–1330 cm^{-1} (б) та в діапазонах хвильового числа 1400–1500 cm^{-1} (в), 2700–3000 cm^{-1} (г) та розклад на компоненти ($\lambda_{36} = 488$, $T = 298$ К)

ня дефектних електронних рівнів, локалізованих в межах енергетичної щілини. До таких дефектів можуть належати дієнові, полієнові структури [22–25]. Такі дефекти можуть виникати в результаті взаємодії макромолекул з наповнювачами, в першу чергу в розглянутих іммобілізованих шарах. Механохімічна дія наповнювача приводить до перебудови числа вініленових, вінільних і кінцевих подвійних зв'язків. Крім того, полієнові структури, як елементи з делокалізованими електронами, мають сприяти перенесенню зарядів в полімерній матриці [26–29]. В результаті утворення полієнових структур можна очікувати покращення тунельних переходів електронів в полімерній матриці.

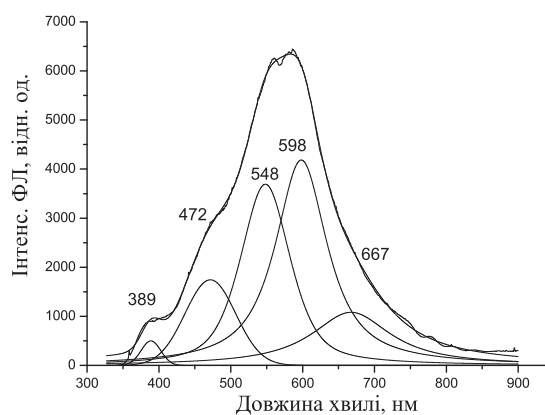
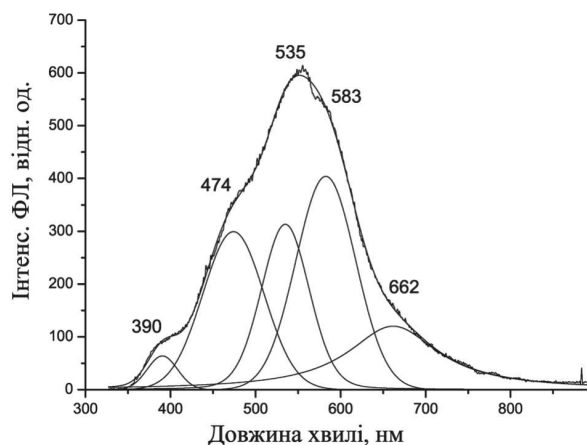
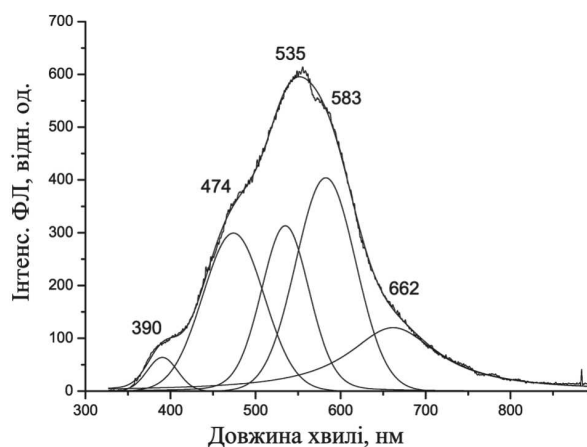


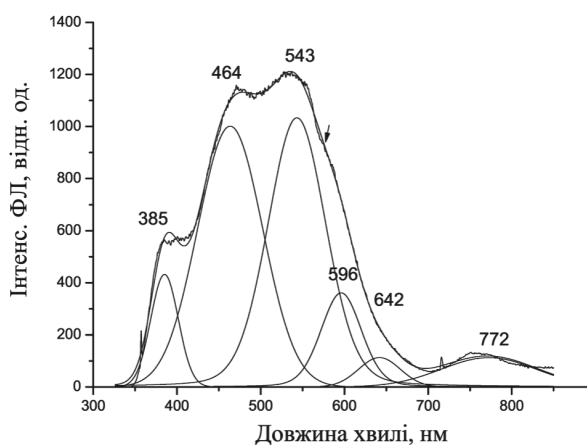
Рис. 5. Спектр ФЛ ПЕНГ та розклад на компоненти ($\lambda_{36} = 325$ нм, $T = 298$ К)



а



б



в

Рис. 6. Спектри ФЛ для нанокompозитів ПЕНГ-БВНТ з вмістом нанотрубок 0,001 (а), 0,005 (б), 0,03 об. част. (в) та їх розклад на компоненти

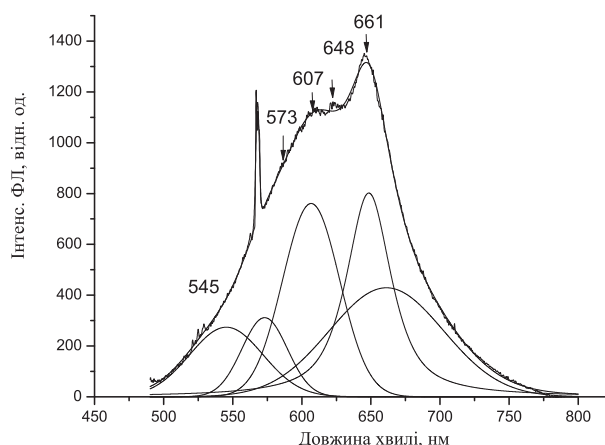


Рис. 7. Спектр ФЛ для нанокompозита ПЕНГ-БВНТ з вмістом нанотрубок 0,03 об. част. ($\lambda_{36} = 488$)

На рис. 5 наведено спектр флуоресценції (ФЛ) ПЕНГ при збудженні з довжиною хвилі $\lambda_{36} = 325$ нм.

Видно, що спектр ФЛ ПЕНГ у вихідному стані складається з кількох компонент, які зумовлені рекомбінацією розірваних С-С зв'язків (389 нм), оксидами з карбонільними групами С=О (472 нм), та поліенами типу $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}-$ або $-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ різної довжини (548 нм, 598 нм, 667 нм) [30]. При допуванні поліетилену нанотрубками спектр ФЛ істотно перебудовується, рис. 6.

Видно, що вже за концентрації нанотрубок 0,001 об. част. спектр ФЛ перебудовується, але зміщення піків незначне. За більших концентрацій 0,005 об. част. і особливо за 0,03 об. част. спостерігається істотне зміщення спектра ФЛ в короткохвильову область, що свідчить про зменшення довжини полієнових ланцюгів. Крім того, істотно зменшується інтенсивність ФЛ, що може бути наслідком її гасіння нанотрубками, а можливо і зменшенням концентрації полієнів.

В більшій мірі перебудова спектра ФЛ спостерігається при $\lambda_{36} = 488$ нм, рис. 7.

Оскільки при $\lambda_{36} = 488$ нм спектр ФЛ відповідає лише присутності полієнових структур різної довжини, то видно, що присутність наповнювачів істотно впливає на дефектну структуру адсорбованих шарів полімеру.

Таким чином, механо-хімічний вплив нанотрубок приводить до перебудови структури полімерної матриці, що може істотно впливати на конта-

ктний шар між нанотрубками, а отже впливати на механічні та транспортні властивості нанокompозитів.

4. Висновки

Концентраційна поведінка динамічних модулів пружності, зсуву в нанокompозитах ПЕНГ-БВНТ свідчить про орієнтаційну структурованість макромолекул, адсорбованих на нанотрубках. Із зміною концентрації нанотрубок відбувається перебудова спектрів КРС, що зумовлено зміною орієнтаційної структури і конформації макромолекул, іммобілізованих на поверхні нанотрубок за малого вмісту наповнювача.

Крім структурних змін відбувається перебудова дефектів, зумовлених породженням карбонільних груп С=О та поліенів різної довжини. З підвищенням вмісту нанотрубок відбувається переродження полієнових структур в бік зменшення їх розмірів, що супроводжується перебудовою енергетичних станів і, як наслідок, зміною спектрів фотолюмінесценції.

1. А.В. Елецкий. Carbon nanotubes. *УФН* **167**, 945 (1997).
2. А.В. Елецкий. Carbon nanotubes and their emission properties. *УФН* **172**, 401 (2002).
3. А.В. Елецкий. Sorption properties of carbon nanostructures. *УФН* **174**, 1191(2004).
4. А.В. Елецкий. Transport properties of carbon nanotubes. *УФН* **179**, 225 (2009).
5. А.В. Елецкий. Carbon nanotube-based electron field emitters. *УФН* **180**, 897 (2010).
6. М.О. Lisunova *et al.* Percolation behaviour of ultra-high molecular weight polyethylene/multi-walled carbon nanotubes composites, *Europ. Polym. J.* **43**, 949 (2007).
7. Є.П. Мамуня, В.В. Левченко, Є.В. Лебедев. Thermomechanical and electrical properties of segregated polymer nanocomposites based on polyvinyl chloride and carbon nanotubes. *Полімерний журнал* **30**, 324 (2008).
8. А.В. Елецкий. Электрические характеристики полимерных композитов, содержащих углеродные нанотрубки. *УФН* **185**, 225 (2015).
9. А.В. Елецкий. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе. *УФН* **177**, 223 (2007).
10. Я.И. Эстрин, Э.Р. Бадамшина, А.А. Грищук и др. *Высокомолекулярные соединения. Серия А* **54**, 568 (2008).
11. А.Л. Свистков, Л.А. Комар, G. Heinrich и др. *Высокомолекулярные соединения. Серия А* **50**, 903(2008).
12. Б.А. Комаров, Э.А. Джавадян, В.И. Иржак и др. *Высокомолекулярные соединения. Серия А* **53**, 897 (2011).
13. S. A. Gordeyev, G. Yu. Nikolaeva, K.A. Prokhorov. The Raman study of the structure of oriented polyethylenes. *Laser Phys.* **6**, 121 (1996).
14. K.A. Prokhorov, G.Yu. Nikolaeva, S.A. Gordeyev, P.P. Pashinin, Raman scattering in oriented polyethylene: The C–H stretching region. *Laser Phys.* **11**, 86 (2001).
15. T. McNally, P. Potschke, P. Halley *et al.* Polyethylene multiwalled carbon nanotube composites. *Polymer* **46**, 8222 (2005).
16. O.S. Nychyporenko, O.P. Dmytrenko, M.P. Kulish, T.M. Pinchuk-Rugal', Yu.Ye. Grabowskiy, M.A. Zabolotniy, V.A. Strel'chuk, A.S. Nikolenko, Yu.I. Sementsov, Ye.P. Mamunya. Radiation technologies of polymer composites properties modification. In: *Nanotechnology in the Security Systems*. Edited by J. Bonča, S. Kruchinin (Springer, 2013), p. 69.
17. O.S. Nychyporenko, O.P. Dmytrenko, M.P. Kulish *et al.* Radiation-induced structure transformation and vibrational spectra of polyethylene. *Nucl. Phys. At. Energy* **16**, 367 (2015).
18. O.S. Nychyporenko, O.P. Dmytrenko, M.P. Kylish *et al.* Radiation-stimulated alteration of electrical conductivity of polyethylene nanocomposites with carbon nanotubes. *Vopr. At. Nauki Tekhn.* **102**, 99 (2016) (in Ukrainian).
19. T. Kida, T. Oku, Y. Hiejima *et al.* Deformation mechanism of high-density polyethylene probed by in situ Raman spectroscopy. *Polymer* **58**, 88 (2015).
20. T. Kida, Y. Hiejima, K.-H. Nitta. Rheo-optical Raman study of microscopic deformation in high-density polyethylene under hot drawing. *Polymer Test.* **44**, 30 (2015).
21. T. Kida, Y. Hiejima, K.-H. Nitta. Raman spectroscopic study of high-density polyethylene during tensile deformation. *Int. J. Exper. Spectrosc. Techn.* **1**, 001 (2016).
22. N. Garcia, M. Koyos, G. Teyssedre *et al.* The grafting of luminescent side groups onto poly(vinyl chloride) and the identification of local structural features, *Polym. Degrad. Stabil.* **92**, 2300 (2007).
23. S. Giuffrida, G.G. Condorelli, L.L. Costanzo. In situ synthesis of photoluminescent films of PVC, doped with Ce³⁺ ion. *J. Photochem. Photobiol. A* **195**, 215 (2008).
24. Z. Osawa, H. Kuroda. Differences in polyene formation between polyethylene and polypropylene during photoirradiation. *Polym. Photochem.* **7**, 231 (1986).
25. S. Balbanov, K. Velitchkova, K. Krezhov. Photoluminescence of carbon-implanted ultra-high molecular weight polyethylene composite and its modification by gamma irradiation. *Vacuum* **69**, 107 (2003).
26. H.M. Zidan, A. Tawansi, M. Abu-Elnader. Miscibility, optical and dielectric properties of UV-irradiated poly(vi-

- nylacetate)/poly(methylmethacrylate) blends. *Physica B* **339**, 78 (2003).
27. H.M. Zidan. Filling level effect on the physical properties of MgBr₂- and MgCl₂-filled poly(vinyl acetate) films. *J. Polymer Sci.* **41**, 112 (2003).
28. H.M. Zidan, M. Abu-Elnader. Structural and optical properties of pure PMMA and metal chloride-doped PMMA films. *Physica B* **335**, 308 (2005).
29. H.M. Zidan, A. El-Khodary, I.A. El-Sayed, H.I. El-Bohy. Optical parameters and absorption studies of UV-irradiated azo dye-doped PMMA films, *J. Appl. Polymer Sci.* **117**, 1416 (2010).
30. M.A. Aliksandrov, T.M. Pinchuk-Rugal, O.P. Dmytrenko, M.P. Kulish, V.V. Shlapatska, V.M. Tkach. Radiation-stimulated formation of polyene structures in polyethylene nanocomposites with multi-walled carbon nanotubes. In: *Nanocomposites, Nanostructures, and Their Applications. NANO 2018*. Edited by O. Fesenko, L. Yatsenko (Springer, 2019), p. 323.

Одержано 13.02.20

L.A. Bulavin, M.A. Aliksandrov, A.I. Misiura, T.M. Pinchuk-Rugal', A.P. Onanko, Yu.E. Grabovskiy, O.P. Dmytrenko, M.P. Kulish, O.L. Pavlenko, T.O. Busko, I.P. Pundyk, A.I. Lesiuk, V.V. Strelchuk

MECHANISMS OF STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN POLYETHYLENE NANOCOMPOSITES WITH MULTI-WALLED CARBON NANOTUBES

The dynamic elastic Young, E' , and shear, G' , moduli in low-density polyethylene nanocomposites with multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) have been studied. It is shown that those parameters are nonmonotonic with the increasing nanotube concentration. The orientational structure of macromolecules adsorbed on nanotubes begins to play an important role, as the MWCNT content grows. Its modification gives rise to changes in the vibrational spectra and the electronic structure of composites and, as a result, may improve their mechanical and transport properties.

Keywords: nanocomposites, dynamic elastic modulus, dynamic shear modulus, physical and mechanical properties.