



DOI: <http://dx.doi.org/10.15688/jvolsu10.2014.6.8>

УДК 538.95:538.91

ББК 30

## НОВЫЕ СТОМАТОЛОГИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ, АРМИРОВАННЫЕ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ: ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ

**Запороцкова Ирина Владимировна**

Доктор физико-математических наук, профессор,  
директор института приоритетных технологий,  
Волгоградский государственный университет  
[irinazaporotskova@gmail.com](mailto:irinazaporotskova@gmail.com)  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Элбакян Лусине Самвеловна**

Аспирант, ассистент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения,  
Волгоградский государственный университет  
[lusniak-e@yandex.ru](mailto:lusniak-e@yandex.ru)  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Аннотация.** Предложена технология создания новых стоматологических материалов на основе быстротвердеющей стоматологической пластмассы «Карбодент» путем армирования углеродными нанотрубками. Получены образцы композитных полимерных материалов с различным процентным содержанием нанотрубок, приведены результаты измерения их прочностных характеристик. Теоретически с использованием полуэмпирического квантово-химического метода MNDO изучен механизм взаимодействия основных компонентов «Карбодента» и однослойных углеродных нанотрубок. Проанализированы различные варианты ориентации компонентов «Карбодента» относительно поверхности нанотрубок. На основе анализа полученных практических и теоретических исследований сделаны выводы о целесообразности создания нового стоматологического материала путем армирования стоматологических полимеров углеродными нанотрубками, обладающими уникальными прочностными характеристиками.

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, стоматологическая пластмасса «Карбодент», полимерные композиционные материалы, армирование, микротвердость, полуэмпирический квантово-химический метод MNDO, адсорбционное взаимодействие.

### Введение

Полимерные материалы (пластмассы) широко применяются в стоматологии для изготовления протезов и ортодонтических аппа-

ратов (капп, шин), зубных пломб. Применяют быстротвердеющие пластмассы как холодного, так и горячего отверждения. Однако пластмассы холодного отверждения содержат в 5–10 раз большее количество остаточного мо-

номера по сравнению с пластмассами горячего отверждения [5; 7; 8]. Это приводит к выщелачиванию мономера с поверхности стоматологического изделия и, как следствие, более быстрому старению полимера и снижению его прочностных характеристик, что негативно отражается на сроке службы ортодонтического аппарата. Установлено, что срок службы ортодонтического аппарата из быстротвердеющей пластмассы меньше продолжительности ортодонтического лечения [7]. Поэтому создание новых стоматологических материалов, обладающих улучшенными характеристиками, является весьма актуальной задачей.

В последнее десятилетие особые ожидания в области создания новых материалов связывают с использованием уникальных углеродных наноматериалов – углеродных нанотрубок (УНТ) [2; 3; 13; 14; 15], которые обладают уникальными характеристиками, в том числе механическими и сорбционными [9; 10; 16]. Именно поэтому они могут быть использованы как эффективное средство повышения прочностных свойств полимерных материалов [13], получаемых путем армирования полимерной матрицы углеродными нанотрубками. Для создания нового материала с требуемыми характеристиками необходимо добиться хорошего сопряжения между поверхностью УНТ и полимерной матрицей. Это обеспечит эффективную передачу нагрузки от полимерного материала нанотрубке и, в конечном счете, приведет к повышению прочностных характеристик и улучшению эксплуатационных свойств созданного композита [4; 6]. Ожидается, что полученный композитный материал будет обладать повышенной (по сравнению с полимерной матрицей) прочностью при сохранении требуемой пластичности.

В связи с вышеизложенным целью настоящего исследования явилось создание нового композиционного материала (композиционного полимера) на основе быстротвердеющей пластмассы «Карбодент», армированной углеродными нанотрубками, исследование прочностных свойств полученного полимера и теоретическое исследование механизмов образования армированного композита.

### Краткая характеристика полимерного материала «Карбодент»

Карбодент – пломбирочный материал на основе акриловых сополимеров [5]. Он представляет собой композицию типа «порошок – жидкость» с наполнителем, отвердевающую при комнатной температуре. Порошок «Карбодента», помимо тройного сополимера метилметакрилата, бутилметакрилата и метакриловой кислоты, содержит около 40 % минерального наполнителя – кварца, а также оксид цинка и пероксид бензоила. Жидкость карбодента – метилметакрилат, содержащий аддукт эпоксидной смолы и метакриловой кислоты, диметилпартолуидин, стабилизатор и антистаритель. Рассмотрим более детально основные составляющие «Карбодента» для определения возможности реализации взаимодействия этих составляющих с углеродными нанотрубками, результатом которого станет создание нового полимерного композита, обладающего повышенными эксплуатационными характеристиками.

**Метилметакрилат** – сложный метиловый эфир метакриловой кислоты; бесцветная, маслянистая жидкость с ароматическим запахом, легко испаряется и воспламеняется. Химическая формула метилметакрилата:  $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{COOCH}_3$ . Более 50 % производимого метилметакрилата используется для получения акриловых полимеров.

**Бутилметакрилаты** – бутиловые эфиры метакриловой кислоты; химическая формула:  $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{COOC}_4\text{H}_9$ . Это бесцветные жидкости с неприятным резким запахом, хорошо растворимые в органических растворителях, но практически не растворимые в воде.

**Метакриловая кислота** – метилпропеновая кислота; химическая формула:  $\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{COOH}$ , бесцветная жидкость с резким запахом, растворима в воде и органических растворителях.

Полимерный состав сложной стоматологической пластмассы «Карбодент» позволяет рассмотреть вопрос о возможности армирования данного материала углеродными нанотрубками при возникновении взаимодействия между ними и отдельными составляющими рассматриваемой пластмассы.

**Экспериментальные исследования**

В экспериментальной части работы была подготовлена серия образцов с различным процентным содержанием УНТ (0,01 %, 0,03 %, 0,05 %) и без углеродных нанотрубок (0 %). Для допирования были взяты углеродные нанотрубки высокой чистоты (производитель – ООО «Таунит», Россия). Процедура получения композитных полимерных материалов описана в работе [1]. Все образцы были подвергнуты испытанию на твердость (с помощью микротвердомера по методу Роквелла). Затем полученные результаты сравнивались между собой (табл. 1).

Таблица 1

**Значения твердости образцов с разным процентным содержанием углеродных нанотрубок**

Содержание УНТ в полимере, %	0	0,01	0,03	0,05
Твердость $\pm \sigma$ , HRC 45 к/мм <sup>2</sup>	39 $\pm$ 4	44 $\pm$ 2	52 $\pm$ 4	68 $\pm$ 2

*Примечание.*  $\sigma$  – среднеквадратичное отклонение.

На рисунке 1 представлена зависимость среднего значения твердости материала от процентного содержания УНТ.

**Теоретические исследования**

Для определения возможности реализации предложенного механизма адсорбционного взаимодействия компонентов «Карбо-

дента» с поверхностью углеродных нанотрубок были выполнены MNDO-расчеты [11; 13] процесса взаимодействия основных полимерных компонентов «Карбодента» (метилметакрилата, бутилового метакрилата, метакриловой кислоты) и однослойной углеродной нанотрубки типа (6, 6). Молекулярный кластер нанотрубки содержал 96 атомов углерода, а оборванные связи на границе замыкались псевдоатомами водорода. Процесс моделировался пошаговым приближением (с шагом 0,1 Å) молекул компонентов полимера-матрицы («Карбодента») к внешней поверхности углеродной нанотрубки вдоль нормали, проведенной к атому углерода поверхности, находящемуся в центре кластера. Выбор места адсорбции в центре молекулярного кластера позволяет избежать краевых эффектов влияния на процесс псевдоатомов. Геометрические параметры системы оптимизировались на каждом шаге. В структуре молекул компонентов были выбраны наиболее активные центры, которые способны обеспечить стабильную связь молекул с поверхностью УНТ. Так, для молекулы метакриловой кислоты такими центрами являлись: центр 1 – атом кислорода, центр 2 – атом водорода, центр 3 – атом углерода с замещением радикального атома водорода (см. рис. 2). Соответственно, были исследованы три варианта (1, 2, 3) ориентации молекулы относительно поверхности углеродной нанотрубки.

В результате выполненных теоретических расчетов построены энергетические кри-



Рис. 1. Зависимость микротвердости образцов композиционного материала на основе «Карбодента», армированного углеродными нанотрубками, взятыми в различном процентном содержании

вые, характеризующие процесс адсорбционного взаимодействия молекулы метакриловой кислоты с УНТ (рис. 3). Основные характеристики взаимодействия представлены в таблице 2.

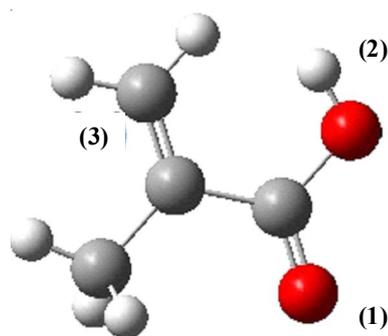


Рис. 2. Молекула метакриловой кислоты с указание возможных активных центров (1), (2), (3)

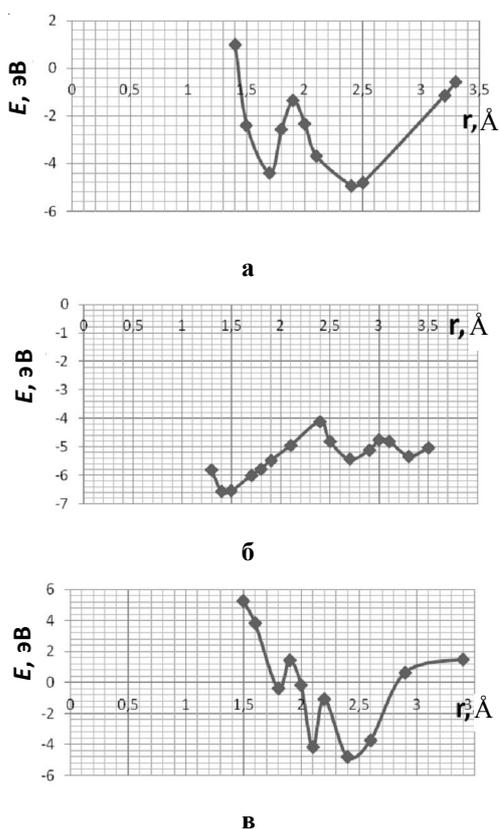


Рис. 3. Энергетические кривые, характеризующие процесс адсорбционного взаимодействия молекулы метакриловой кислоты с УНТ:  
 а – с использованием активного центра 1 – атома кислорода (вариант 1); б – с использованием активного центра 2 – атома водорода (вариант 2); в – с использованием активного центра 3 – атома углерода молекулы метилметакрилата с замещением радикального атома водорода (вариант 3)

Таблица 2

**Основные характеристики взаимодействия молекулы метакриловой кислоты с УНТ для трех вариантов ориентации молекулы относительно поверхности УНТ**

Вариант присоединения молекулы	$r, \text{Å}$	$E_{\text{ад}}, \text{эВ}$	$E_{\text{акт}}, \text{эВ}$
1	2,4	-4,79	3,73
	2,1	-4,19	5,61
	1,8	-0,39	
2	2,5	-4,01	2,66
	1,7	-4,41	
3	3,3	-5,33	0,57
	2,7	-5,47	1,35
	1,4	-6,57	

Примечание.  $r$  – расстояние адсорбции,  $E_{\text{ад}}$  – энергия адсорбции,  $E_{\text{акт}}$  – высота потенциального барьера.

Анализ результатов показал, что максимальное значение энергии адсорбции достигается, когда молекула метилметакрилат приближена к УНТ активным центром 3 (атом углерода) на расстояние 3,3 Å (наиболее глубокий минимум на кривой). Для того, чтобы попасть в следующее стабильное состояние (минимум на кривой на расстоянии 2,7 Å), молекуле необходимо преодолеть небольшой потенциальный барьер, отождествляемый с энергией активации  $E_{\text{акт}} = 0,57 \text{ эВ}$ . Этот барьер может быть легко преодолен, так как его значение ниже тепловой энергии  $kT$ . Следовательно, можно сделать вывод, что наиболее энергетически выгодным является случай, когда взаимодействие молекулы метакриловой кислоты с внешней поверхностью углеродной нанотрубки осуществляется с использованием активного центра – атома углерода. Такое взаимодействие соответствует случаю физической адсорбции.

Для молекулы метилметакрилата были исследованы следующие активные центры: а) центр 1 – атом кислорода молекулы; б) центр 2 – атом углерода молекулы метилметакрилата с замещением радикального атома водорода (рис. 4). Соответственно, изучены варианты 1 и 2 взаимодействия молекулы с поверхностью нанотрубки.

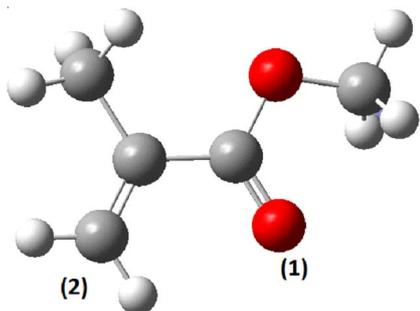
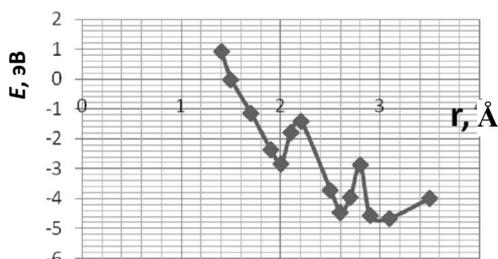


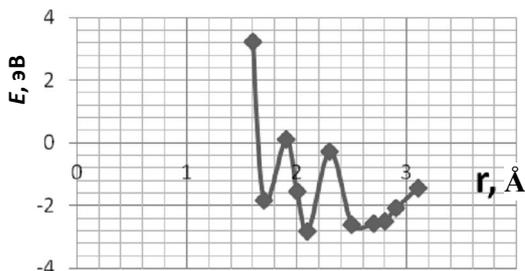
Рис. 4. Молекула метилметакрилат с указанием активных центров (1), (2)

На рисунке 5 представлены кривые взаимодействия УНТ с молекулой метилметакрилата. Основные характеристики взаимодействия представлены в таблице 3.

Так как максимальная энергия адсорбции соответствует расстоянию 3,2 Å между молекулой и атомом углерода поверхности нанотрубки, то можно сделать вывод, что энергетически наиболее выгодным является вариант, когда взаимодействие осуществляется с использованием активного центра 1 – атом кислорода молекулы метилметакрилата. Реализуется взаимодействие, которое соответствует физической адсорбции.



а



б

Рис. 5. Энергетические кривые, характеризующие процесс адсорбционного взаимодействия молекулы метилметакрилата с УНТ:

а – с использованием активного центра 1 – атома кислорода; б – с использованием активного центра 2 – атома углерода молекулы метилметакрилата с замещением радикального атома водорода

Таблица 3

**Основные характеристики взаимодействия молекулы метилметакрилата с УНТ для трех вариантов ориентации молекулы относительно поверхности УНТ**

Вариант присоединения молекулы	$r, \text{Å}$	$E_{\text{ад}}, \text{эВ}$	$E_{\text{акт}}, \text{эВ}$
1	3,2	-4,67	1,79
	2,4	-3,85	
	2,0	-2,83	
2	2,5	-2,60	2,33
	2,1	-2,83	
	1,7	-1,84	

Примечание.  $r$  – расстояние адсорбции,  $E_{\text{ад}}$  – энергия адсорбции,  $E_{\text{акт}}$  – высота потенциального барьера.

Для молекулы бутилметакрилата были исследованы следующие активные центры: а) центр 1 – атом кислорода; б) центр 2 – атом углерода молекулы метилметакрилата с замещением радикального атома водорода; в) центр 3 – атом водорода (рис. 6).

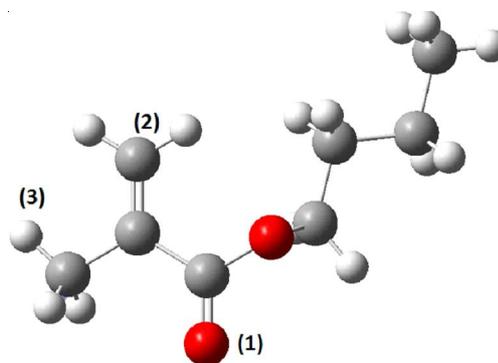


Рис. 6. Молекула бутилметакрилата с указанием активных центров (1), (2), (3)

На рисунке 7 представлена энергетическая кривая взаимодействия УНТ с молекулой бутилметакрилата при использовании активного центра 1 (атом кислорода). С другими активными центрами молекулы бутилметакрилата сопряжения УНТ не происходит. Основные характеристики взаимодействия представлены в таблице 4. Максимальная энергия адсорбции соответствует расстоянию 3,2 Å, реализуется адсорбционное взаимодействие, которое соответствует случаю физической адсорбции.

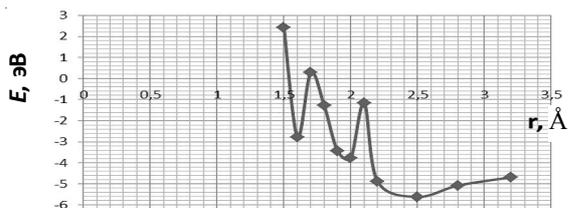


Рис. 7. Энергетическая кривая, характеризующая процесс адсорбционного взаимодействия молекулы бутилметакрилата с УНТ при использовании активного центра 1 (атом кислорода)

Таблица 4

**Основные характеристики взаимодействия молекулы метилметакрилата с УНТ для трех вариантов ориентации молекулы относительно поверхности УНТ**

Вариант присоединения молекулы	$r, \text{Å}$	$E_{\text{ад}}, \text{эВ}$	$E_{\text{акт}}, \text{эВ}$
1	3,2	-4,67	0,90
	2,0	-3,77	
	1,6	-5,61	1,84

Примечание.  $r$  – расстояние адсорбции,  $E_{\text{ад}}$  – энергия адсорбции,  $E_{\text{акт}}$  – высота потенциального барьера.

**Заключение**

Результаты измерения микротвердости позволили сделать вывод о том, что даже незначительное количество углеродных нанотрубок, введенных в общий объем полимерной матрицы «Карбодента» (0,05 %), обеспечивает существенное улучшение эксплуатационных характеристик стоматологической пластмассы без критического ухудшения его цветовой характеристики. Теоретические расчеты доказали, что механизм, обеспечивающий хорошее сопряжение полимерной основы-матрицы с армирующими углеродными нанотрубками, – адсорбционное взаимодействие основных составляющих «Карбодента» (метилметакрилата, бутилового метакрилата, метакриловой кислоты) с поверхностью углеродных нанотрубок. Композитные армированные углеродными нанотрубками полимеры такого состава могут быть рекомендованы к использованию не только в практике ортодонтии, но и в общестоматологической практике для создания высокопрочных

пломб. Подобные полимерные системы целесообразно применять для создания протезов, изготовления ортодонтических аппаратов, временных протезов, индивидуальных оттисковых ложек.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Допированные углеродными нанотрубками померы – новые материалы в стоматологии / И. В. Запороцкова, С. В. Дмитриенко, Н. Н. Климова, А. Н. Крутойаров, А. С. Горобченко // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 10, Инновационная деятельность. – 2012. – Вып. 6. – С. 68–74.
2. Дьячков, П. Н. Электронные свойства и применение нанотрубок / П. Н. Дьячков. – М. : БИНОМ, 2010. – 488 с.
3. Запороцкова, И. В. Перспективные наноматериалы на основе углерода / И. В. Запороцкова, Л. В. Кожитов, В. В. Козлов // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 10, Инновационная деятельность. – 2009-2010. – № 4. – С. 63–85.
4. Исследование механизма влияния углеродных нанотрубок на физико-механические свойства нанокомпозитов / В. А. Богатов, С. В. Кондрашов, И. А. Мансурова, В. Т. Минаков // Авиационные материалы и технологии. – 2012. – № 5. – С. 353–359.
5. Композиционные пломбирочные материалы / В. И. Лукьяненко, К. А. Макаров, М. З. Штейнгарт, Л. С. Алексеева. – Л. : Медицина, 1988. – 160 с.
6. Модифицирование эпоксидных полимеров малыми добавками многослойных углеродных нанотрубок / С. В. Кондрашов, В. П. Грачев, Р. В. Акатенков, В. Н. Алексахин, И. С. Деев, И. В. Аношин, Э. Г. Раков, В. И. Иржак // Высокомолекулярные соединения. – 2014. – Т. 56, № 3. – С. 316.
7. Трезубов, В. Н. Ортопедическая стоматология. Прикладное материаловедение : учеб. для мед. вузов / В. Н. Трезубов, М. З. Штейнгарт, Л. М. Мишнев ; под ред. проф. В. Н. Трезубова. – СПб. : Специальная литература, 1999. – 234 с.
8. Brel, A. K. Polymer materials in clinical dentistry / A. K. Brel, S. Dmitrienko, O. Kotlyarevsky. – Volgograd : LLC «Form», 2006. – 223 с.
9. Carbon Nanotubes, New Material for Purification of Water-Ethanol Mixtures from Isomers of Propanol / I. V. Zaporotzkova, N. P. Polikarpova, T. A. Ermakova, and D. I. Polikarpov // Russian Journal of General Chemistry. – 2013. – Vol. 83, №. 8. – P. 1601–1606. – DOI: 10.1134/S1070363213080227.
10. Carbon Nanotubes as a New Material for the Purification of Alcohol-Containing Liquids / I. V. Zaporotzkova, N. P. Polikarpova, T. A. Ermakova, D. I. Polikarpov // Nanoscience and Nanotechnology

Letters. – 2012. – Vol. 4, № 11. – P. 1044–1049. – DOI: <http://dx.doi.org/10.1166/nml.2012.1473>.

11. Dewar, M. J. S. A semiempirical model for the two-center repulsion integrals in the NDDO approximation / M. J. S. Dewar, W. Thiel // *Theoret. Chem. Acta.* – 1977. – Vol. 46. – P. 89–104.

12. Dewar, M. J. S. Ground states of molecules. 38. The MNDO method. Approximations and Parameters / M. J. S. Dewar, W. Thiel // *J. Amer. Chem. Soc.* – 1977. – Vol. 99. – P. 4899–4906.

13. Dresselhaus, M. S. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and application / M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. Avouris. – Springer-Verlag, 2000. – 464 p.

14. Krutoyarov, A. A. About adsorption of polyethylene monomer unit on the single-walled carbon nanotube surface / A. A. Krutoyarov // *Nanoscience & nanotechnology 2013 : 14<sup>th</sup> International Workshop on Nanotechnology*, 30 Sept. – 4 Oct. 2013. Frascati National Laboratories INFN. Book of abstract. – Italy, Frascati, 2013. – P. 82.

15. Zaporotskova, I. V. Carbon and non-carbon composite nanomaterials and structures on their basis: structure and electronic properties / I. V. Zaporotskova. – Volgograd: Izd-vo VolGU, 2009. – 490 p.

16. Zaporotskova, I. V. Internal Investigation of Saturation Carbon Nanotubes Molecular Hydrogen / I. V. Zaporotskova // *Russian Journal of Physical Chemistry B.* – 2011. – Vol. 5, № 3. – P. 530–536. – DOI: 10.1134/S1990793111030274.

## REFERENCES

1. Zaporotskova I.V., Dmitrienko S.V., Klimova N.N., Krutoyarov A.N., Gorobchenko A.S. Dopirovannye uglerodnymi nanotrubkami pomery novye materialy v stomatologii [*Pomers Doped With Carbon Nanotubes New Materials in Dentistry*]. *Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 10, Innovatsionnaya deyatelnost* [Science Journal of Volgograd State University. Technology and innovations], 2012, iss. 6, pp. 68-74.

2. Dyachkov P.N. *Elektronnyye svoystva i primeneniye nanotrubok* [Electronic Properties and Application of Nanotubes]. Moscow, BINOM Publ., 2010. 488 p.

3. Zaporotskova I.V., Kozhitov L.V., Kozlov V.V. Perspektivnye nanomaterialy na osnove ugleroda [Promising Carbon-Based Nanomaterials]. *Vestnik Volgogradskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 10, Innovatsionnaya deyatelnost* [Science Journal of Volgograd State University. Technology and innovations], 2009-2010, no. 4, pp. 63-85.

4. Bogatov V.A., Kondrashov S.V., Mansurova I.A., Minakov V.T. Issledovanie

mekhanizma vliyaniya uglerodnykh nanotrubok na fiziko-mekhanicheskie svoystva nanokompozitov [Investigation of the Mechanism of Carbon Nanotubes Influence on the Mechanical Properties of Nanocomposites]. *Aviatsionnye materialy i tekhnologii*, 2012, no. 5, pp. 353-359.

5. Lukyanenko V.I., Makarov K.A., Shteyngart M.Z., Alekseeva L.S. *Kompozitsionnye plombirovochnye materialy* [Composite Filling Materials]. Leningrad, Meditsina Publ., 1988. 160 p.

6. Kondrashov S.V., Grachev V.P., Akatenkov R.V., Aleksashin V.N., Deev I.S., Anoshin I.V., Rakov E.G., Irzhak V.I. Modifitsirovanie epoksidnykh polimerov malymi dobavkami mnogoslonykh uglerodnykh nanotrubok [Modification of Epoxy Polymers by Small Additions of Multiwall Carbon Nanotubes]. *Vysokomolekulyarnye soedineniya*, 2014, vol. 56, no. 3, p. 316.

7. Trezubov V.N., Shteyngart M.Z., Mishnev L.M. *Ortopedicheskaya stomatologiya. Prikladnoe materialovedenie: uchebnik dlya meditsinskikh vuzov* [Prosthetic Dentistry. Applied Material Study. Handbook for Medical Universities]. Saint Petersburg, Spetsialnaya literatura Publ., 1999. 234 p.

8. Brel A.K., Dmitrienko S., Kotlyarevsky O. *Polymer Materials in Clinical Dentistry*. Volgograd, LLC "Form", 2006. 223 p.

9. Zaporotskova I.V., Polikarpova N.P., Ermakova T.A., Polikarpov D.I. Carbon Nanotubes, New Material for Purification of Water/Ethanol Mixtures From Isomers of Propanol. *Russian Journal of General Chemistry*, 2013, vol. 83, no. 8, pp. 1601-1606. DOI: 10.1134/S1070363213080227.

10. Zaporotskova I.V., Polikarpova N.P., Ermakova T.A., Polikarpov D.I. Carbon Nanotubes as a New Material for the Purification of Alcohol-Containing Liquids. *Nanoscience and Nanotechnology Letters*, 2012, vol. 4, no. 11, pp. 1044-1049. DOI: <http://dx.doi.org/10.1166/nml.2012.1473>.

11. Dewar M.J.S., Thiel W. A Semiempirical Model for the Two-Center Repulsion Integrals in the NDDO Approximation. *Theoret. Chem. Acta*, 1977, vol. 46, pp. 89-104.

12. Dewar M.J.S., Thiel W. Ground States of Molecules. 38. The MNDO Method. Approximations and Parameters. *J. Amer. Chem. Soc.*, 1977, vol. 99, pp. 4899-4906.

13. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Avouris P. *Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Application*. Springer-Verlag, 2000. 464 p.

14. Krutoyarov A.A. About Adsorption of Polyethylene Monomer Unit on the Single-Walled Carbon Nanotube Surface. *Nanoscience & Nanotechnology 2013: 14<sup>th</sup> International Workshop on Nanotechnology*, 30 September 4 October 2013. Italy, Frascati, 2013, p. 82.

15. Zaporotzkova I.V. *Carbon And Non-Carbon Composite Nanomaterials and Structures on Their Basis: Structure and Electronic Properties*. Volgograd, Izd-vo VolGU, 2009. 490 p.

16. Zaporotzkova I.V. Internal Investigation of Saturation of Carbon Nanotubes Molecular Hydrogen. *Russian Journal of Physical Chemistry B.*, 2011, vol. 5, no. 3, pp. 530-536. DOI: 10.1134/S1990793111030274.

## NEW DENTAL MATERIALS REINFORCED BY CARBON NANOTUBES: THE TECHNOLOGY OF OBTAINING AND THE STUDY OF PROPERTIES

**Zaporotzkova Irina Vladimirovna**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor,  
Director of Institute of Priority Technologies,  
Volgograd State University  
irinazaporotzkova@gmail.com  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Elbakyan Lusine Samvelovna**

Postgraduate Student, Assistant,  
Department of Forensic Expertise and Physical Materials Science,  
Volgograd State University  
lusniak-e@yandex.ru  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Abstract.** Polymeric materials (plastics) are widely used in dentistry for implants and dental fillings. Therefore, the development of new dental materials with improved characteristics, is a very important task.

In the last decade special expectations in the field of creation of new materials are associated with the use of unique carbon nanomaterials – carbon nanotubes, which have unique characteristics. That is why they can be used as an effective means of improving strength properties of polymeric materials obtained by the reinforcement of the polymer matrix and carbon nanotubes.

The authors propose the technology of creating new dental materials based on the basis of rapid-hardening dental plastic material “Karbodent” by reinforcing carbon nanotubes. The samples of new polymer materials with different percentages of nanotubes were obtained, the results of measurement of their strength characteristics were provided. The mechanism of interaction of the basic components of “Karbodent” and single-wall carbon nanotubes are theoretically studied. The various orientations of the main components of “Karbodent” were analyzed in relation to the surface of carbon nanotubes. A semi empirical quantum chemical MNDO method is the main method of calculation. On the basis of the analysis of theoretical and practical studies, the authors made conclusions about the feasibility of a new dental material using carbon nanotubes with unique strength characteristics.

The composites reinforced by carbon nanotubes polymers can be recommended for use not only in the practice of orthodontics, but also in creating high-strength seals. Such polymer systems are useful for creating prosthetic fabrication of orthodontic appliances, temporary prostheses.

**Key words:** carbon nanotubes, dental plastic material “Karbodent”, polymer composition materials, reinforcement, micro-hardness, semi-empirical quantum and chemical MNDO method, adsorption interaction.