Journal of Advances in Physical Chemistry 物理化学进展, 2026, 15(4), 289-300
Published Online November 2026 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/japc
https://doi.org/10.12677/japc.2026.154028

碳纳米管对HNBR拉伸性能影响的模拟研究

李　果[1,2,3,4]，仲蕊瑞[1]，张　烽[1*]，谭　超[1*]，郑超越[1]，巩建鸣[2]，苏　浩[3]

[1]南京工程学院机械工程学院，江苏　南京
[2]南京工业大学机械工程学院，江苏　南京
[3]中电科联海创智信息科技有限公司，新疆　乌鲁木齐
[4]常州大学绿色过程装备江苏省高校重点实验室，江苏　常州

收稿日期：2026年9月9日；录用日期：2026年10月27日；发布日期：2026年11月9日

摘　要

本研究采用分子动力学(MD)模拟，探讨碳纳米管(CNTs)手性及表面功能化对氢化丁腈橡胶(HNBR)拉伸行为的影响。使用COMPASS III力场，构建了纯HNBR、含(9,9)和(12,6) CNTs以及含不同官能团的复合材料模型。结果表明，(9,9) CNTs因较高的轴向刚度表现出更优的增强效果。表面功能化显著改善了界面载荷传递，其中CNT-COOH的拉伸强度最高，这归因于羧基形成了致密的多点氢键网络。本研究为高性能橡胶纳米复合材料的设计提供了理论基础。

关键词

氢化丁腈橡胶，碳纳米管，分子动力学模拟，表面功能化，力学性能

Simulation Study on Effect of Carbon Nanotubes on Tensile Properties of HNBR

Guo Li[1,2,3,4], Ruirui Zhong[1], Feng Zhang[1*], Chao Tan[1*], Chaoyue Zheng[1], Jianming Gong[2], Hao Su[3]

[1]School of Mechanical Engineering, Nanjing Institute of Technology, Nanjing Jiangsu
[2]School of Mechanical Engineering, Nanjing Tech University, Nanjing Jiangsu
[3]China Electronics Technology Corporation Lianhai Chuangzhi Information Technology Co., Ltd., Urumqi Xinjiang
[4]Green Process Equipment Key Laboratory of Jiangsu Provincial University, Changzhou University, Changzhou Jiangsu

Received: September 9, 2026; accepted: October 27, 2026; published: November 9, 2026

*共同通讯作者。

文章引用: 李果, 仲蕊瑞, 张烽, 谭超, 郑超越, 巩建鸣, 苏浩. 碳纳米管对 HNBR 拉伸性能影响的模拟研究[J]. 物理化学进展, 2026, 15(4): 289-300. DOI: 10.12677/japc.2026.154028

Abstract

In this study, molecular dynamics (MD) simulation was employed to investigate the effects of carbon nanotube (CNT) chirality and surface functionalization on the tensile behavior of hydrogenated nitrile butadiene rubber (HNBR). Based on the COMPASS III force field, composite models were constructed, including pure HNBR, HNBR reinforced with (9,9) and (12,6) CNTs, and HNBR filled with CNTs modified by different functional groups. The results show that (9,9) CNTs exhibit superior reinforcement performance due to their higher axial stiffness. Surface functionalization significantly improves interfacial load transfer. Among all modified systems, the CNT-COOH composite achieves the highest tensile strength, which is attributed to the dense multi-site hydrogen bond network formed by carboxyl groups. This study provides a theoretical basis for the design of high-performance rubber nanocomposites.

Keywords

Hydrogenated Nitrile Rubber, Carbon Nanotubes, Molecular Dynamics Simulation, Surface Functionalization, Mechanical Properties

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).
http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Open Access

1. 引言

氢化丁腈橡胶(HNBR)是通过对丁腈橡胶中的不饱和双键进行氢化制得的高性能弹性体材料[1] [2]，兼具优异的耐油性、耐化学腐蚀性与良好的耐热老化性能[3] [4]。因此，HNBR 广泛应用于汽车、航空航天与油气开采行业，尤其多用于承受复杂拉伸载荷的密封零部件中[5] [6]。随着服役工况要求不断提高，工程应用中的核心挑战在于如何在保留 HNBR 弹性特性的同时提升其力学性能。

为提升 HNBR 的力学性能，研究人员针对炭黑、二氧化硅、石墨烯、碳纳米管等多种填料体系开展了大量研究。李锐等人[7]阐明了炭黑填充 HNBR 中裂纹扩展特性的温度依赖性，建立了统一的疲劳裂纹扩展动力学模型与寿命预测模型。孙旭等人[8]证实，添加适量石墨烯(4 phr)可显著改善高温与钻井液环境下 HNBR 的耐热氧老化性能。针对其他改性填料，曹强等人[9]利用山梨酸原位改性层状双氢氧化物(LDH)增强 HNBR，通过接枝/配位机制显著提升了复合材料的综合力学性能。孙旭等人[10]研究了甲基丙烯酸镁(MgMA)对 HNBR 的改性效果，发现其可有效改善材料的高温耐油与抗老化性能。

其中，碳纳米管凭借极高的拉伸强度、弹性模量与长径比，被认为是极具应用前景的橡胶增强填料。实验与模拟研究均证实，引入碳纳米管可显著提升 HNBR 复合材料的拉伸性能、耐老化性能与摩擦磨损性能。殷博等人[11]发现，多壁碳纳米管与炭黑复配在橡胶共混体系中表现出显著的协同效应，大幅提升了材料的模量与导热性能。在耐老化研究方面，李浩等人[12]探究了多壁碳纳米管对稀氧介质中 HNBR 老化行为的影响，发现其可显著提升老化后材料拉伸强度与断裂伸长率的保留率。王明等人[13]制备了接枝抗氧剂的羧基化碳纳米管，结合分子动力学模拟从原子尺度阐明了碳纳米管限制分子链运动、提升耐热氧老化性能的作用机理。钱晨等人[14]对比了碳纳米管与石墨烯在抑制抗氧剂挥发、改善 HNBR 耐老化与摩擦学性能方面的不同作用机制。此外，在摩擦磨损机理方面，梁晨等人[15]结合分子动力学模拟与实验，深入分析了水润滑与干摩擦条件下碳纳米管对丁腈橡胶摩擦系数与磨损量的改善作用。滕飞等人

[16]同样采用分子动力学模拟，从自由体积分数与结合能角度揭示了碳纳米管提升橡胶材料摩擦学性能的增强机理。上述研究均一致验证了碳纳米管作为橡胶基复合材料增强相的有效性。

碳纳米管是一类具有超高拉伸强度与弹性模量的一维纳米材料，其独特的管状结构与高长径比使其可在聚合物基体中有效承载并传递应力，从而提升复合材料的力学性能。现有研究表明碳纳米管可改善橡胶材料的拉伸性能，但关于碳纳米管手性与表面官能化对 HNBR 拉伸应力–应变行为影响的研究仍不充分[17]-[20]。

本研究采用分子动力学模拟，构建了建模、优化与平衡流程一致的纯 HNBR 与 HNBR/碳纳米管复合模型。通过拉伸模拟，对比了纯 HNBR、HNBR/(9,9) CNT、HNBR/(12,6) CNT 复合材料，以及不同官能化(9,9)碳纳米管增强 HNBR 复合材料的应力–应变特征。研究旨在阐明碳纳米管手性与表面官能化对 HNBR 拉伸性能的影响，为开发高强度 HNBR 复合材料提供理论支撑。

2. 研究对象与方法

本研究基于 MaterialsStudio 软件的 Forcite 模块开展分子动力学模拟，选用 COMPASS III 力场描述成键与非成键相互作用。该力场已被广泛应用于预测聚合物及其复合体系的力学性能，可有效表征 HNBR 与碳纳米管体系内的分子相互作用。所有模拟均采用周期性边界条件，以降低有限尺寸效应对结果的影响。拉伸模拟前，所有模型均经过严格的结构优化与多步动力学平衡处理，包括能量最小化、退火处理，以及在 NVT 与 NPT 系综下的充分弛豫。该过程旨在尽可能消除体系内的残余应力，获得稳定的初始结构状态。需要说明的是，在分子尺度下，受热涨落与体系有限尺寸影响，即便体系达到完全平衡，宏观应变为零时计算得到的瞬时应力张量仍可能存在非零值。该初始应力主要源于原子热运动与局部结构波动，是分子动力学模拟中的普遍现象，并不对应宏观尺度下的实际残余应力。因此，后续分析重点关注不同体系拉伸变形过程中应力演化的趋势与相对增强效果，而非初始应力的绝对值。

2.1. 研究对象

研究对象为丙烯腈含量 39%的 HNBR(中等丙烯腈含量，兼顾耐油性与柔韧性)与单壁碳纳米管(SWCNTs)。研究共设置三类碳纳米管：两种手性的未改性碳纳米管，分别为(9,9)型与(12,6)型；官能化碳纳米管：在(9,9)碳纳米管表面接枝羟基(-OH)、羧基(-COOH)与氨基(-NH_2) (接枝率 10%，保证均匀分散且不发生团聚)。

通过对比纯 HNBR、HNBR/(9,9) CNT、HNBR/(12,6) CNT、HNBR/CNT-OH、HNBR/CNT-COOH 与 HNBR/CNT-NH_2 复合材料的拉伸应力–应变行为，分析碳纳米管手性与官能化的调控作用。

2.2. 研究方法

纯 HNBR 基体模型的构建与优化平衡：首先利用 Materials Studio 软件构建 HNBR 聚合物的丁烷链段与丙烯腈链段，如图 1 所示。在此基础上，构建聚合度为 50 的 HNBR 分子链，氢化度设置为 100%，丙烯腈质量分数设置为 39%。随后采用 Amorphous Cell 模块构建周期性重复单元，模拟盒中包含 8 条上述 HNBR 分子链，预设密度为 0.95g/cm^3。

为保证模型稳定性，对上述体系进行多步平衡处理，具体流程如下：

1) 结构优化：采用 Smart 算法进行全结构优化，能量收敛判据设为 0.0001 kcal/mol，力收敛判据设为 0.005 kcal/(mol·Å)，最大迭代步数设为 100,000；

2) 退火处理：在 200 K 至 400 K 温度范围内进行 5 轮能量退火，每个温度节点在 NVT 系综下进行 50 ps 的动力学平衡；

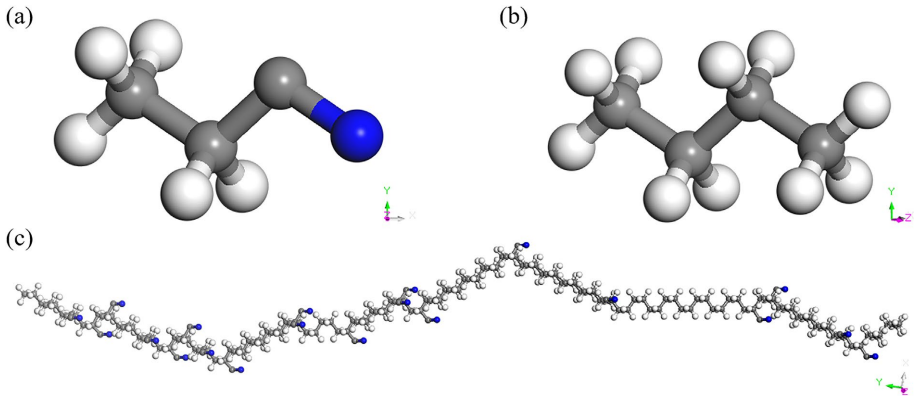


Figure 1. Molecular models of HNBR: (a) acrylonitrile segment, (b) hydrogenated butadiene segment, (c) HNBR polymer chain
图 1. HNBR 分子模型：(a) 丙烯腈链段，(b) 氢化丁二烯链段，(c) HNBR 聚合物链

3) NVT 系综动力学平衡：在 298 K 下进行 500 ps 的 NVT 系综动力学模拟，使体系获得充分的动力学弛豫；

4) NPT 系综动力学平衡：在常温(298 K)常压(0.1 MPa)下进行 1 ns 的 NPT 系综动力学弛豫，模拟时间步长为 1 fs，非键相互作用截断半径为 15.5 Å。

上述分子动力学计算均采用周期性边界条件，选用 COMPASS III 力场，模拟精度设为 Fine 等级；温度控制采用 Andersen 方法，压力控制采用 Berendsen 方法，最终得到结构稳定的纯 HNBR 基体模型。

官能化碳纳米管模型构建：通过 Build Nanostructure 模块构建(9,9)型与(12,6)型两种手性的单壁碳纳米管。两种碳纳米管长度均为 20 Å，其中(9,9)碳纳米管直径约为 12.4 Å，(12,6)碳纳米管直径约为 13.2 Å。官能化碳纳米管制备过程中，选取碳纳米管表面 10%的碳原子进行官能团接枝，分别引入羟基(-OH)、羧基(-COOH)与氨基(-NH_2)，得到 CNT-OH、CNT-COOH 与 CNT-NH_2 三种官能化纳米填料，五种模型的几何结构如图 2 所示。

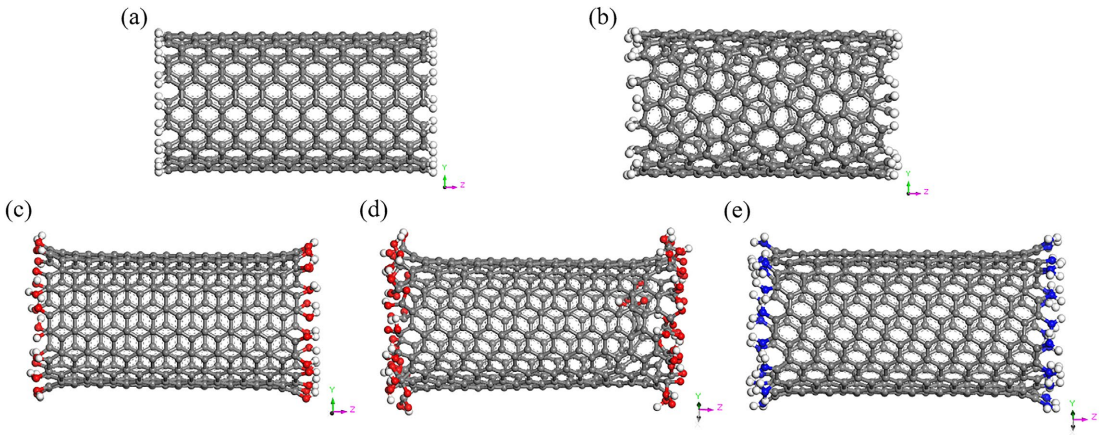


Figure 2. Five molecular models of CNTs: (a) (9,9) CNT, (b) (12,6) CNT, (c) CNT-OH, (d) CNT-COOH, (e) CNT-NH
图 2. 五种碳纳米管分子模型：(a) (9,9) CNT，(b) (12,6) CNT，(c) CNT-OH，(d) CNT-COOH，(e) CNT-NH

HNBR/碳纳米管复合体系的构建与优化平衡：将上述经过结构优化的碳纳米管模型分别置于纯 HNBR 基体模拟盒的中心，构建 HNBR/碳纳米管复合体系。纯基体与复合材料的最终模拟模型如图 3、图 4 所示。复合体系采用与纯 HNBR 基体完全相同的优化与平衡流程(结构优化→退火处理→NVT 系综

平衡→NPT 系综平衡)进行处理，以保证复合体系的结构稳定性。

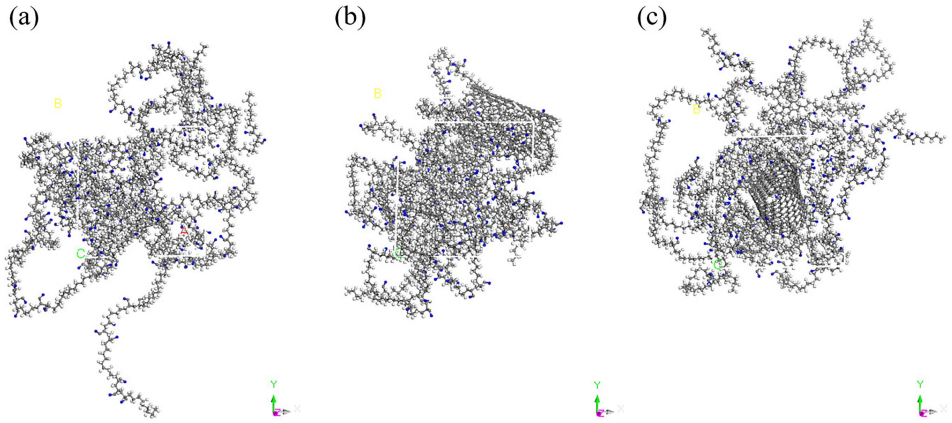


Figure 3. The simulation models of (a) pure HNBR, (b) HNBR composite with (9,9) CNT, and (c) HNBR composite with (12,6) CNT
图 3. (a) 纯 HNBR、(b) 含(9,9)碳纳米管的 HNBR 复合材料与(c) 含(12,6)碳纳米管的 HNBR 复合材料仿真模型

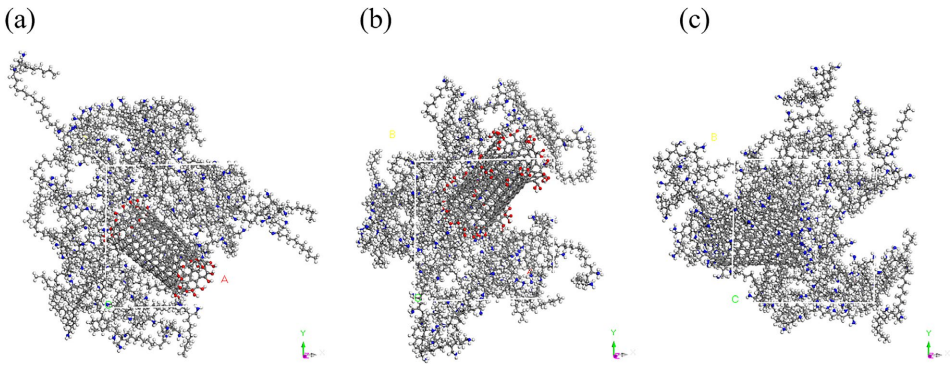


Figure 4. The simulation models of (a) HNBR composite with CNT-OH, (b) HNBR composite with CNT-COOH, and (c) HNBR composite with CNT-NH_2
图 4. (a) CNT-OH 改性、(b) CNT-COOH 改性、(c) CNT-NH_2 改性碳纳米管填充 HNBR 复合材料仿真模型

2.3. 拉伸模拟与数据计算

所有分子动力学模拟均在 Materials Studio 软件的 Forcite 模块中完成。采用 COMPASS III 力场描述原子间相互作用，该力场可对研究材料的力学性能做出准确预测。采用 Nose-Hoover-Langevin (NHL)热浴将温度维持在 298 K，采用 Souza-Martins 压控器调控压力，以实现对应力张量的精确调控。静电相互作用采用 Ewald 求和法计算，范德华相互作用采用基于原子的求和法处理，截断距离为 12.5 Å；时间步长设为 1 fs。

为获取应力－应变关系，采用 NPT 系综下的应力控制方法。体系首先在零应力条件下进行平衡阶段，以减小内部残余应力并优化晶胞尺寸。该阶段共包含 5 个循环，每个循环由 100 ps 的 NPT 动力学组成；每个循环开始时重置晶胞矢量并将速度置零，以加速收敛。平衡结束后，采用分级应力加载方案，沿变形轴依次施加离散应力值；每个应力加载等级下运行 500 ps 的动力学模拟；轨迹前段用于该应力状态下的体系平衡，后段用于数据采集。

通过监测模拟晶胞的几何形态对变形进行量化。记录每个应力条件下的平均晶胞矩阵，并与零应力下的参考晶胞矩阵对比，计算对称应变张量。

3. 计算结果与分析

3.1. 纯 HNBR 的拉伸应力–应变行为

纯 HNBR 基体的拉伸应力–应变响应如图 5 所示，对应数据列于表 1。曲线呈现出橡胶类材料典型的非线性弹性特征。初始阶段(应变<5%)，应力随应变近似线性增长，对应由键长拉伸与键角弯曲主导的弹性变形区。随着应变进一步增大，材料发生应变硬化，分子链沿拉伸方向取向重排，应力逐步上升。根据模拟数据，纯 HNBR 在应变为 17.03%时达到峰值应力约 251.02 MPa，随后应力小幅下降，表明体系开始出现结构失效。

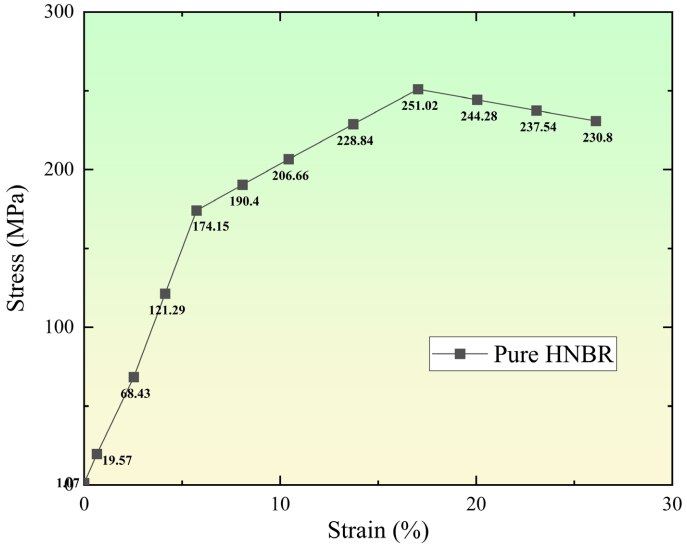


Figure 5. Tensile stress-strain curve of pure HNBR
图 5. 纯 HNBR 的拉伸应力–应变曲线

Table 1. Tensile stress-strain data of pure HNBR
表 1. 纯 HNBR 的拉伸应力–应变数据

Strain (%)	Stress (MPa)
0	1.07
0.65	19.57
2.53	68.43
4.13	121.29
5.73	174.15
8.08	190.4
10.43	206.66
13.73	228.84
17.03	251.02
20.05	244.28
23.07	237.54
26.1	230.8

3.2. 碳纳米管手性对 HNBR 力学性能的影响

为探究碳纳米管几何构型对增强效率的影响，对扶手椅型(9,9)碳纳米管与手性型(12,6)碳纳米管增强的复合材料进行了模拟。选取这两种手性碳纳米管，用于评估原子尺度对称性对单轴拉伸下宏观力学响应的影响。如图 6 所示，以及表 2、表 3 的定量总结可见，无论手性如何，碳纳米管的加入均可显著提升 HNBR 基体的力学性能，但两种体系的增强能力存在明显差异。HNBR/(9,9) CNT 复合材料表现出更优异的应力响应，呈现出持续的应变硬化行为，在应变为 25.5%时最大应力达到 298.20 MPa。相比之下，HNBR/(12,6) CNT 复合材料的增强效果相对较弱，峰值应力为 272.74 MPa (应变 22.06%)，随后出现应力下降。该数据明确表明，扶手椅构型在 HNBR 基体中可提供更有效的承载机制。

(9,9)碳纳米管性能更优的内在机理，主要源于原子几何结构与轴向刚度的本征关联。(9,9)碳纳米管具有高度对称的非手性结构，其碳－碳键沿纳米管轴向呈特定取向排列。这种“扶手椅”排布方式可最大化抵抗拉伸载荷下的轴向键拉伸与键角畸变。因此，(9,9)碳纳米管在柔性聚合物基体中可充当高刚性骨架，高效承担由 HNBR 分子链传递的轴向载荷。与之相反，(12,6)碳纳米管的碳原子呈螺旋排布，由于其构成键与载荷方向存在偏折，本征轴向杨氏模量低于扶手椅型纳米管。

失效行为与极限强度的差异，受手性纳米结构特有的拉－扭耦合现象显著影响。根据纳米尺度连续力学原理，当(12,6)这类手性结构承受单轴拉伸时，体系会产生同时发生扭转变形的趋势，以最小化势能。然而，在复合体系中，该扭转行为受到周围 HNBR 聚合物链与界面范德华力的约束。这种约束会在碳纳米管－聚合物界面形成复杂的多轴应力状态，引入非手性(9,9)碳纳米管变形中不存在的剪切分量。这些附加剪切应力会弱化界面，导致载荷传递效率降低，并可能引发界面提前脱粘，对应模拟中(12,6)体系更早出现的应力下降现象。(9,9)碳纳米管的高结构对称性使纳米管表面应力分布更均匀；在扶手椅结构中，周围聚合物链感受到的周期性势能面更规整，有利于形成稳定的界面相互作用。(12,6)碳纳米管的不对称性可能导致局部应力集中，螺旋应力波沿管壁传播，这些局部热点会成为断裂萌生点，使复合材料无法承受更高应变。更高的本征轴向刚度、无拉－扭耦合效应、更均匀的应力分布，共同使(9,9)碳纳米管相比(12,6)碳纳米管对 HNBR 基体具有更强的增强效果。

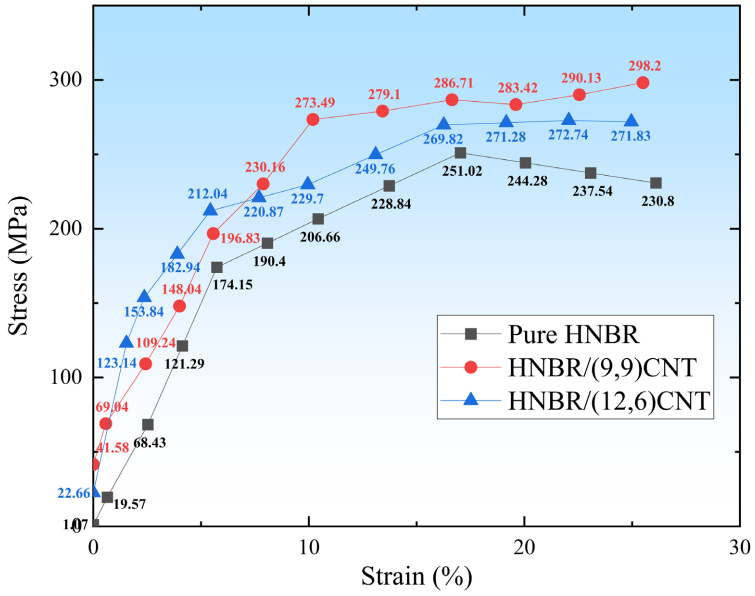


Figure 6. Tensile stress-strain curves of pure HNBR and HNBR composites reinforced with (9,9) CNTs and (12,6) CNTs
图 6. 纯 HNBR 以及(9,9)、(12,6)碳纳米管增强 HNBR 复合材料的拉伸应力－应变曲线

Table 2. Tensile stress-strain data of HNBR composite with (9,9) CNT
表 2. 含(9,9)碳纳米管 HNBR 复合材料的拉伸应力－应变数据

Strain (%)	Stress (MPa)
0	41.58
0.58	69.04
2.43	109.24
4	148.04
5.57	196.83
7.88	230.16
10.19	273.49
13.42	279.1
16.64	286.71
19.6	283.42
22.55	290.13
25.5	298.2

Table 3. Tensile stress-strain data of HNBR composite with (12,6) CNT
表 3. 含(12,6)碳纳米管 HNBR 复合材料的拉伸应力－应变数据

Strain (%)	Stress (MPa)
0	22.66
1.54	123.14
2.37	153.84
3.9	182.94
5.43	212.04
7.69	220.87
9.95	229.7
13.1	249.76
16.26	269.82
19.16	271.28
22.06	272.74
24.96	271.83

3.3. 表面官能化对 HNBR 力学性能的影响

为进一步优化界面性能，对(9,9)碳纳米管进行羟基(-OH)、羧基(-COOH)与氨基(-NH_2)官能团改性。如图 7 及表 4~6 所示，模拟结果表明表面官能化可显著提升复合材料的力学强度。值得注意的是，增强效率排序为：-COOH > -NH_2 > -OH > 未改性；其中 CNT-COOH 体系性能提升最为显著，强度几乎达到未改性体系的两倍(达到 591.33 MPa)。

CNT-COOH 体系性能优异的主导机理，是在碳纳米管-HNBR 界面形成了极强且致密的氢键网络。关键在于，羧基具有独特的化学结构，包含两个氧原子：一个羰基氧(C=O)与一个羟基氧(-OH)。该结构

特征使羧基同时具备强氢键给体与受体的双重能力，可与 HNBR 链上的极性腈基(-CN)以及分子主链形成稳定的多点位氢键。相比之下，羟基(-OH)仅含单个氧原子，氨基(-NH_2)则依靠氮原子成键。单位官能团下，羧基可提供更高密度的界面相互作用活性位点。这种强烈的“类双齿”氢键相互作用可有效“锁定”纳米管表面附近的聚合物链，最大化界面结合能，实现从基体到增强相最高效的应力传递。

尽管-NH_2 与-OH 也可通过极性与氢键作用改善界面，但与 CNT-COOH 体系相比，其增强效果相对较弱。氨基(-NH_2)通过与腈基形成氢键构建稳定界面(393.59 MPa)，但相互作用强度与网络密度低于富氧羧基形成的界面。同样，虽然羟基改性相比未改性(9,9)碳纳米管可提升性能(328.90 MPa)，但其单个氧原子限制了氢键网络的复杂度与强度，导致高应变下更易发生界面滑移。值得说明的是，尽管所有官能团

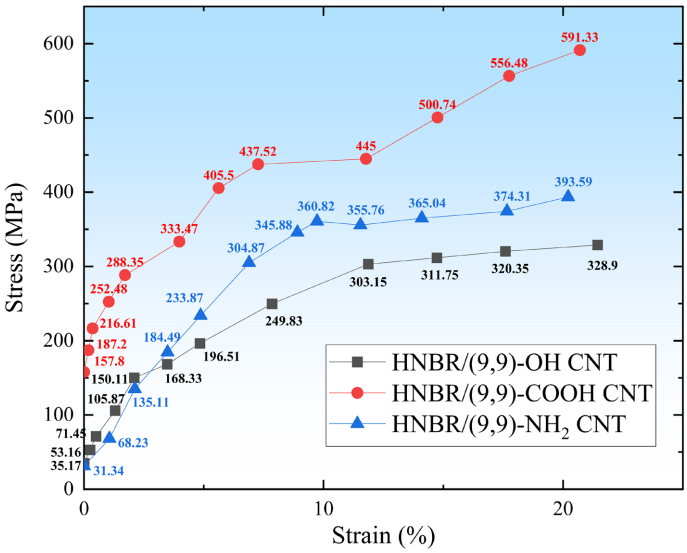


Figure 7. Tensile stress-strain curves of HNBR composites reinforced with CNT-OH, CNT-COOH, and CNT-NH_2
图 7. CNT-OH、CNT-COOH 以及 CNT-NH_2 增强 HNBR 复合材料的拉伸应力－应变曲线

Table 4. Tensile stress-strain data of HNBR composite with CNT-OH
表 4. CNT-OH 改性碳纳米管填充 HNBR 复合材料拉伸应力－应变数据

Strain (%)	Stress (MPa)
0	35.17
0.25	53.16
0.5	71.45
1.3	105.87
2.1	140.11
3.47	168.33
4.84	196.51
7.85	249.83
11.87	303.15
14.73	311.75
17.59	320.35
21.44	328.9

Table 5. Tensile stress-strain data of HNBR composite with CNT-COOH
表 5. CNT-COOH 改性碳纳米管填充 HNBR 复合材料拉伸应力－应变数据

Strain (%)	Stress (MPa)
0	157.8
0.18	187.2
0.36	216.61
1.03	252.48
1.71	288.35
3.98	333.47
5.62	405.5
7.27	437.52
11.77	445
14.76	500.74
17.75	556.48
20.7	591.33

Table 6. Tensile stress-strain data of HNBR composite with CNT-NH_2
表 6. CNT-NH_2 改性碳纳米管填充 HNBR 复合材料拉伸应力－应变数据

Strain (%)	Stress (MPa)
0	31.34
1.06	68.23
2.12	135.11
3.49	184.49
4.87	233.87
6.89	304.87
8.91	345.88
9.73	360.82
11.54	355.76
14.1	365.04
17.66	374.31
20.21	393.59

均可通过空间位阻改善(9,9)碳纳米管的分散性，防止形成弱团聚，但该作用属于次要贡献。三种官能化体系力学强度的显著差异，本质上由各官能团形成氢键的能力决定，羧基的双氧结构可提供最强的界面粘附作用。

4. 结论

本研究采用分子动力学模拟探究了HNBR/碳纳米管复合材料的拉伸行为与增强机理，得到如下结论：

(1) 碳纳米管的引入可在聚合物基体中充当刚性承载骨架。该刚性网络可有效承受外加载荷，并促进

应力从基体向增强相传递，使 HNBR/碳纳米管复合材料的拉伸强度与弹性模量相比纯 HNBR 基体得到显著提升。

(2) 碳纳米管手性对增强效率具有显著影响。(9,9)碳纳米管相比(12,6)碳纳米管具有更优异的轴向刚度与载荷传递能力。该差异根本上源于扶手椅构型的高结构对称性与无拉－扭耦合特性。(12,6)碳纳米管在轴向拉伸下会产生寄生扭转剪切作用，降低有效承载能力；而(9,9)碳纳米管仅发生纯轴向变形，因此增强效果更强。

(3) 表面官能化可显著优化界面结合性能，增强效果排序为：-COOH > -NH_2 > -OH > 未改性。在所研究的改性方式中，(9,9) CNT-COOH 的增强效果最为显著。该优异性能主要由羧基独特的双氧化学结构(羰基与羟基)决定；双氧结构可与 HNBR 基体形成极其致密牢固的氢键网络，有效生成高刚度“束缚聚合物层”，最大化界面剪切强度；而-OH 与-NH_2 仅形成单点位相互作用，增强效率相对更低。

基金项目

国家自然科学基金(52305499)；绿色过程装备江苏省高校重点实验室开放课题基金(GPE202502)；江苏省自然科学基金(BK20201031)；南京工程学院科研基金项目(CKJA202101)。

参考文献

[1] Gao, X., Wang, X., Pan, W., Wang, M., Xu, X., Li, Z., *et al*. (2025) Highly Hydrogenated, Solvent-Resistant, Low-Temperature Conductive Nitrile Rubber for Multifunctional Sensors. *Chemical Engineering Journal*, **504**, Article ID: 158735. https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.158735

[2] Guo, Y., Tian, H., Zhang, H., Xiang, G., Han, J., Ning, N., *et al*. (2023) High Heat- and Oil-Resistant and Gas Barrier Thermoplastic Elastomers Based on Hydrogenated Nitrile Rubber and Fluoro-Copolymer. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **62**, 15490-15498. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c02026

[3] Hu, G., Ou, J., Tang, K., Luo, H. and Wang, G. (2024) Influence of Particle Size on Friction and Wear Behavior of Hydrogenated Nitrile Rubber. *Tribology Letters*, **72**, Article No. 52. https://doi.org/10.1007/s11249-024-01854-4

[4] Li, R., Zhou, J., Zhang, Y., He, Y., Shen, R., Ming, S., *et al*. (2025) Performance Changes and Mechanism Research of Hydrogenated Nitrile Rubber in Oil and Gas Well Environments. In: Lin, J., Ed., *Proceedings of the International Field Exploration and Development Conference* 2024, Springer, 1-11. https://doi.org/10.1007/978-981-96-4922-8_1

[5] Mu, F., Yin, H., Liu, X., Nie, J., Xu, J., Kadlcak, J., *et al*. (2025) Comparative Study on the Application of Hydrogenated Nitrile Rubber (HNBR) and Ethylene Propylene Diene Monomers (EPDM) in the Sealing Materials of Lithium Batteries. *Electrical Materials and Applications*, **2**, e70027. https://doi.org/10.1049/ema3.70027

[6] Zhou, G., Wu, K., Pu, W., Li, P. and Han, Y. (2022) Tribological Modification of Hydrogenated Nitrile Rubber Nanocomposites for Water-Lubricated Bearing of Ship Stern Shaft. *Wear*, **504**, Article ID: 204432. https://doi.org/10.1016/j.wear.2022.204432

[7] Li, R., Lian, Z. and Wei, W. (2024) Influence of Operating Temperature on Crack Growth Characteristics and Fatigue Life Prediction of Carbon Black-Filled Hydrogenated Nitrile Butadiene Rubber. *Polymers*, **16**, Article 3574. https://doi.org/10.3390/polym16243574

[8] Sun, X., Zhang, G., Zhao, Y., Guo, T., Luo, X., Qi, H., *et al*. (2024) Effect of Graphene on Properties of Hydrogenated Nitrile Butadiene Rubber at High Temperature and Drilling Fluid. In: Lin, J., Ed., *Proceedings of the International Field Exploration and Development Conference* 2023, Springer, 1319-1331. https://doi.org/10.1007/978-981-97-0256-5_111

[9] Cao, Q., Wang, Z., Zhang, Z., Liu, D., Zhu, H. and Wang, Z. (2022) Improved Performance of Layered Double Hydroxide/Hydrogenated Nitrile Rubber Composites by Addition of Sorbic Acid. *Polymer Composites*, **43**, 9169-9178. https://doi.org/10.1002/pc.27094

[10] Sun, X., Zhang, G., Zhao, Y., *et al*. (2023) Effect of Magnesium Methacrylate on the Properties of Hydrogenated Nitrile Butadiene Rubber. *Synthetic Rubber Industry*, **46**, 412-416.

[11] Yin, B., Wen, Y., Jia, H., Wang, J., Xu, Z. and Ding, L. (2017) Synergistic Effects of Hybridization of Carbon Black and Carbon Nanotubes on the Mechanical Properties and Thermal Conductivity of a Rubber Blend System. *Journal of Polymer Engineering*, **37**, 785-794. https://doi.org/10.1515/polyeng-2016-0375

[12] Li, H., Cheng, K., Zhang, Z., Zhao, L., Zhou, H., Wang, H., *et al*. (2021) Effect of Carbon Nanotubes on Aging Properties of Hydrogenated Nitrile Rubber in the Dilute Oxygen Medium. *Journal of Macromolecular Science, Part A*, **59**, 38-45.

https://doi.org/10.1080/10601325.2021.1976653

[13] Wang, M., Li, Y., Qian, C., Wang, S. and Liu, D. (2024) Relationship between the Aging Thermal Oxygen and Mechanical Properties of Nitrile Butadiene Rubber Reinforced by RD-Loaded Carboxylated Carbon Nanotubes. *Applied Surface Science*, **655**, Article 159569. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2024.159569

[14] Qian, C., Wang, S., Li, Y., Nie, R. and Song, S. (2024) Comparative Study on Thermal-Oxygen Aging and Tribological Properties of Carbon Nanotubes and Graphene Sheet Reinforced Hydrogenated Nitrile Rubber Composite Materials. *Journal of Materials Research and Technology*, **29**, 2608-2619. https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.02.055

[15] Liang, C., Shuai, C. and Wang, X. (2024) Molecular Dynamics Simulation and Experimental Study of Friction and Wear Characteristics of Carbon Nanotube-Reinforced Nitrile Butadiene Rubber. *Lubricants*, **12**, Article 261. https://doi.org/10.3390/lubricants12070261

[16] Teng, F., Wu, J., Su, B. and Wang, Y. (2021) Enhanced Tribological Properties of Vulcanized Natural Rubber Composites by Applications of Carbon Nanotube: A Molecular Dynamics Study. *Nanomaterials*, **11**, Article 2464. https://doi.org/10.3390/nano11092464

[17] Jiang, Y., Yong, Z. and Song, J. (2026) Evolution of Filler Network Structure and Performance Evolution of Composite Materials in Carbon Nanotubes in Nitrile Rubber with Different Polarities. *Journal of Applied Polymer Science*, **143**, e70320. https://doi.org/10.1002/app.70320

[18] Liu, G., Wang, H., Ren, T., Chen, Y. and Liu, S. (2024) Systematic Investigation of the Degradation Properties of Nitrile-Butadiene Rubber/Polyamide Elastomer/Single-Walled Carbon Nanotube Composites in Thermo-Oxidative and Hot Oil Environments. *Polymers*, **16**, Article 226. https://doi.org/10.3390/polym16020226

[19] El-Nemr, K.F., Radi, H., Khalaf, A.I. and Hamdy, E.M. (2024) Insight on the Properties of Multi-Walled Carbon Nanotubes Reinforced Nitrile Rubber Composites Cured by Ionizing Radiation or Peroxide: A Comparative Study. *Radiochimica Acta*, **112**, 413-426. https://doi.org/10.1515/ract-2023-0244

[20] Karpunin, R.V., Korotkov, M.S., Skuratov, A.Y. and Khasin, A.A. (2022) Physical and Mechanical Properties of Nitrile Butadiene Rubber Modified by Single-Walled Carbon Nanotube Concentrates. *Inorganic Materials*: *Applied Research*, **13**, 1306-1313. https://doi.org/10.1134/s2075113322050197