

## Количественное изучение механизма взаимодействия производных камфоры с нитратами целлюлозы

© Шарифуллина<sup>1\*</sup> Лейля Азатовна, Баранова<sup>1</sup> Наталья Викторовна, Никитина<sup>2</sup> Лилия Евгеньевна и Шипина<sup>1</sup> Ольга Терентьевна

<sup>1</sup>Кафедра химии и технологии высокомолекулярных соединений. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. Карла Маркса, 68. г. Казань. 420015.

Республика Татарстан. Россия. Тел.: +7 986 720 4894. E-mail: leilyshka1997@mail.ru

<sup>2</sup>Кафедра общей и органической химии. Казанский государственный медицинский университет. ул. Бутлерова, 49. г. Казань. 420012. Республика Татарстан. Россия. E-mail: nikitl@mail.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** нитраты целлюлозы, камфора, камфен, карвон, квантово-химические расчеты, энергия активации, модификация, пластификация.

### Аннотация

В данной работе представлены результаты исследования особенностей физико-химического взаимодействия нитрата целлюлозы с производными камфоры – камфеном и карвоном. Проведены квантово-химические расчеты процессов их взаимодействия, с использованием программы HyperChem. Рассчитаны дипольные моменты исходных соединений и проведена оценка индивидуальной и взаимной растворимости. Определены нуклеофильные и электрофильные свойства нитрата целлюлозы и модификаторов – камфоры, камфена и карвона. Получены значения энергий активации процессов взаимодействия нитратов целлюлозы с производными камфоры. Выявлено, что между ними не происходит химического взаимодействия, так как значения энергий активаций достигают от 1979 кДж/моль до 2882 кДж/моль и молекулы исходных веществ не способны преодолеть такой энергетический барьер. Показана принципиальная возможность получения термоустойчивых композиционных материалов через смешение нитрата целлюлозы с модификаторами (камфора, камфен и карвон) в общем растворителе (ацетон-диэтиловый эфир) в соотношении 60 %:40 % масс. Данные ИК-спектроскопических исследований модифицированных образцов нитратов целлюлозы выявили наличие адсорбции на волокнах нитрата целлюлозы. С помощью рентгеноструктурного анализа выявлено, что модификаторы способствуют аморфизации структуры нитратов целлюлозы. Результаты термомеханического анализа показывают, что при пластификации нитрата целлюлозы камфорой, камфеном и карвоном наблюдается снижение температуры стеклования примерно на 110°C, что характерно для механизма молекулярной пластификации. Данные физико-механического анализа подтверждают данный механизм пластификации и свидетельствуют о том, что добавление модификатора повышает подвижность молекул нитрата целлюлозы, что приводит к повышению эластичности и снижению прочности материала и модуля упругости.