

2. Bannwarth C., Grimme S. *A simplified time-dependent density functional theory approach for electronic ultraviolet and circular dichroism spectra of very large molecules // Computational and Theoretical Chemistry*, 2014. – V. 1040. – P. 45–53.
3. Weigend F. *Accurate Coulomb-fitting basis sets for H to Rn // Physical chemistry chemical physics*, 2006. – V. 8. – № 9. – P. 1057–1065.
4. Angeli C. et al. *Third-order multireference perturbation theory: The n-electron valence state perturbation-theory approach // The Journal of chemical physics*, 2006. – V. 124. – № 5. – P. 054108.

ЛАЗЕР-ОПОСРЕДОВАННАЯ КАРБОНИЗАЦИЯ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКОГО КАРКАСА Ni-BDC НА ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЭЛЕКТРОДНЫХ СИСТЕМ

Е. А. Курцевич, Д. А. Коголев

Научный руководитель – д.х.н., профессор П. С. Постников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, 30, katyacha95@mail.ru

Полиэтилентерефталат (PET) – термопластичный полиэфир, продукт конденсации терефталевой кислоты и этиленгликоля. На сегодняшний день, PET активно применяется при изготовлении различных материалов и изделий ввиду технологических свойств. Тем не менее, широкомасштабное использование данного полимера приводит к увеличению нагрузки на окружающую среду, что заставляет ученых искать новые методы его переработки.

PET имеет в своей структуре звенья терефталевой кислоты, являющейся структурным элементом одного из самых распространенных классов металл-органических каркасов (МОК). МОК зарекомендовали себя в качестве сырья для получения токопроводящих материалов в ходе процессов карбонизации [1, 2].

В рамках настоящего исследования нами был разработан метод лазер-опосредованной трансформации тонких слоев МОК Ni-BDC на поверхности PET для создания новых электродных систем.

Для исследования структуры материала использовались СЭМ, ИК-спектроскопия, КР-спектроскопия (Рис. 2.).

После карбонизации поверхности материала PET@Ni-BDC лазером наблюдали однородное изменение цвета с зеленоватого на черный (Рисунок 2А) с соответствующим изменением морфологии поверхности по данным СЭМ (Рисунок 2Б, В). На ИК-спектрах, наблюдается исчезновение пиков характерных для Ni-BDC. (Рисунок 2Г). На КР-спектрах присутствуют характерные пики графена (1349, 1589, 2695 cm^{-1}) (Рисунок 2Д). Поверхностное сопротивление Ni@C составляет $12,2 \pm 2,5$ Ом/кв.

Таким образом, разработанный метод позволяет получать перспективные электродные материалы с высокой проводимостью на основе отходов PET.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России, Соглашение № 075-15-2022-244.

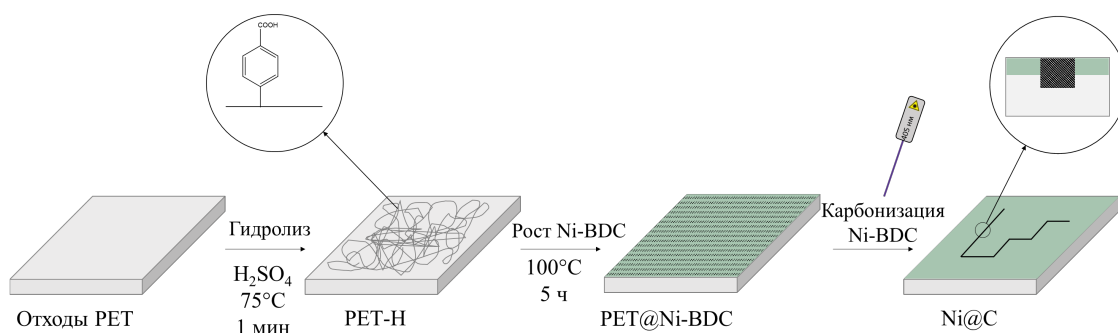


Рис. 1. Принципиальная схема карбонизации Ni-BDC на поверхности PET

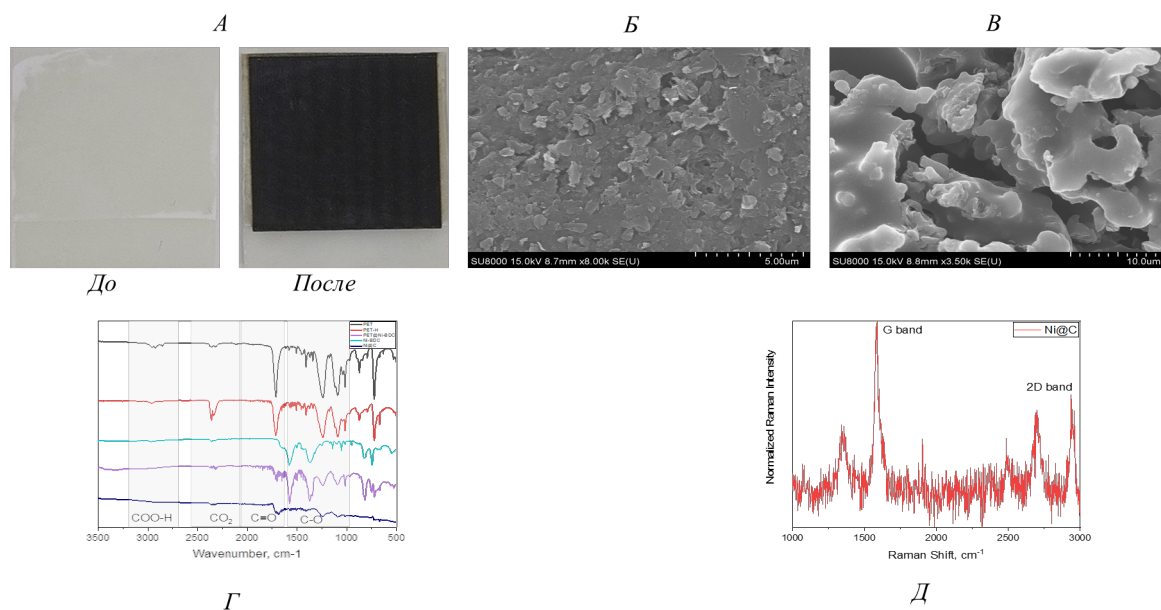


Рис. 2. Материал до и после лазерной обработки (А), снимки PET@Ni-BDC (Б) и Ni@C (В), ИК-спектры PET, гидролизованного PET, Ni-BDC, PET@Ni-BDC и Ni@C (Г), КР-спектр Ni@C (Д)

Список литературы

1. Chen Z. et al. // *J. Mater. Chem. A.*, 2019. – 7. – 25. – P. 14971–15005.
2. Zhao G. et al. // *Anal. Chem.*, 2022. – 94. – 29. – P. 10557–10566.

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОРАЗЛАГАЕМЫХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ КРАХМАЛОВ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ

Т. Е. Кусков^{1,2}

Научный руководитель – к.х.н., с.н.с. Е. М. Подгорбунских

¹Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
Новосибирск, ул. Пирогова 2, t.kuskov@g.nsu.ru

²Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН
Новосибирск, ул. Кутателадзе 18, podgorbunskikh@solid.nsc.ru

Актуальной задачей для человечества является получение биоразлагаемых материалов для хранения и транспортировки продуктов питания за счет использования возобновляемых ресурсов. Наиболее перспективным сырьем для получения упаковочных материалов являются природные полисахариды, так как они могут образовывать кристаллические структуры, которые чередуются с аморфными участками, что дает возможность изменять физические свойства конечных материалов в широком диапазоне эксплуатационных характеристик [1].

Целью данной работы является исследование пленок, полученных из основных типов (А-, В- и С-тип) крахмала с различной степенью упорядоченности кристаллической структуры, а также исследование кинетики высвобождения инкапсулированных веществ.

В качестве объектов исследования были выбраны кукурузный крахмал (А-тип), картофельный крахмал (В-тип) и тапиоковый крахмал (С-тип) (ООО «Гарнец», Россия). Механическая активация крахмала проводилась на планетарной мельнице АГО-2 (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск) в течение 30 секунд и 10 минут. Рентгенофазовый анализ (РФА) проводился на дифрактометре D8 ADVANCE (Bruker, Германия). Изучение процесса высвобождения веществ из пленок было проведено с помощью нитроксильного радикала Proxyl (НИОХ СО РАН, Новосибирск). Запись спектров электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) пленок производилась на ЭПР спектрометре Adani SPINSCAN X (ADANI, Беларусь).

На основе крахмала с различной степенью упорядоченности кристаллической структуры