

**ПАРАМЕТРЫ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СВЯЗЕЙ,
ДЕКОНВОЛЮЦИЯ ОБРАЗЦОВ КРАФТ-БУМАГИ,
ПРОИЗВЕДЕННОЙ НА ЦЕЛЛЮЛОЗНО-
БУМАЖНОМ КОМБИНАТЕ ГРУППЫ "ИЛИМ", Г.
КОРЯЖМА**



Ирина Обухова, доцент СПбГЛТУ
ВШТЭ, СПб | 24 - 25.11.2025

О себе

Образование

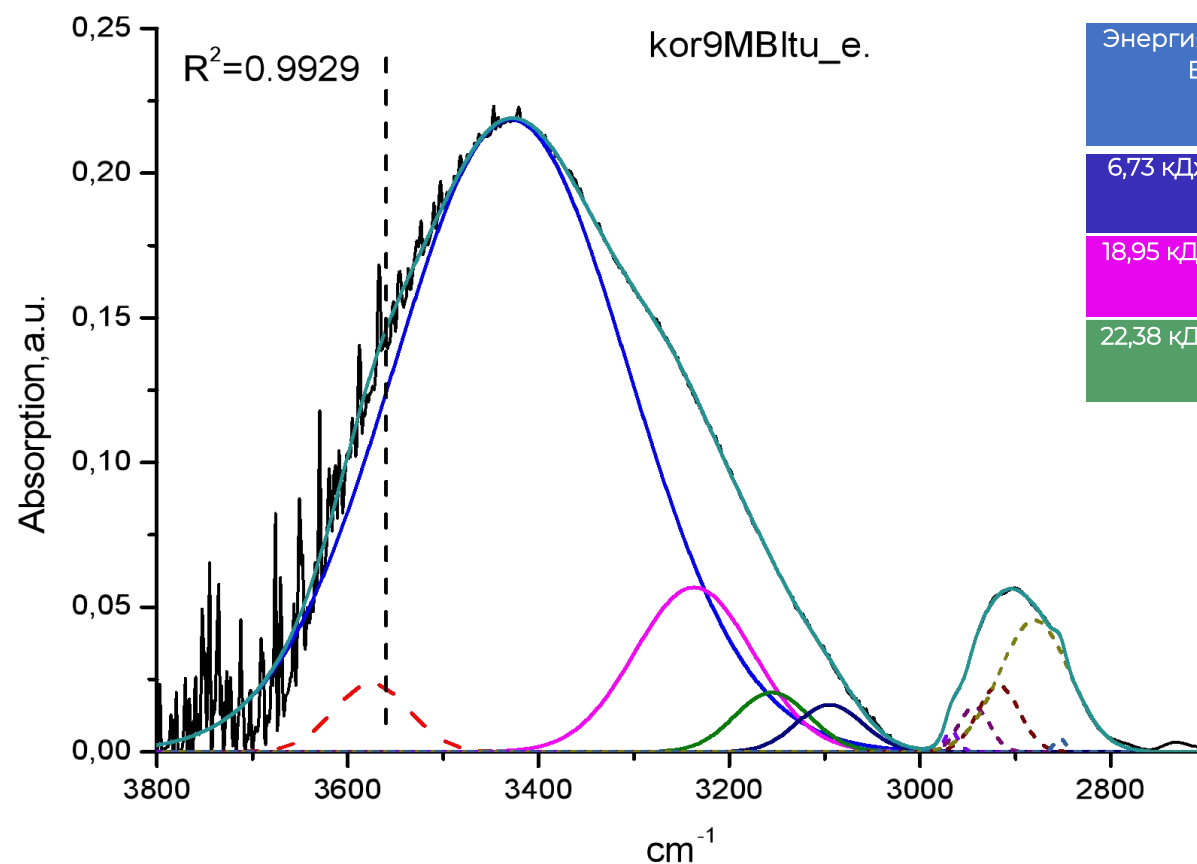
Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет, к.т.н., доцент

Опыт работы

Инженер (АО "ЛенНИИхиимаш" 1993-1995, доцент СПбГЛТУ с 1999 г.



Деконволюция крафт-мешочной бумаги (100 % хвоя (2 0 % сосны, 80% елка, Коряжма)



Энергия связи E	Длина связи d	Плотность связей	Тип водородной связи
6,73 кДж/моль	0,29 нм	76,37 %	внутримолекулярная
18,95 кДж/моль	0,27 нм	110 %	внутримолекулярная
22,38 кДж/моль	0,27 нм	2,27 %	Межмолекулярная

История вопроса

2014 –

Исследования образцов целлюлозы, деревьев коллективом авторов под руководством д.ф.-мат.н. В.И. Иванова-Омского (ФТИ им. А.Ф. Иоффе)

2019

2019 – 2021

Исследования доц., к.ф.-м.н. Е.И. Ивановой (СПбГЛТУ) и соавторов

2021 –

Этап развития

- Факт, событие

2023

Исследование образцов целлюлозы, срезов деревьев коллективом авторов И.А.Обуховой и др. образцов сезонной березы

**2024 –
Present**

**ПАРАМЕТРЫ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СВЯЗЕЙ, ДЕКОНВОЛЮЦИЯ ОБРАЗЦОВ
КРАФТ-БУМАГИ**

Исследование коллективом авторов
Обухова И.А.¹, Пименов С.Д. -- *Санкт-Петербургский Государственный Лесотехнический университет им.С.М.Кирова*

Коцаров А.В. -- ЦБП группы ИЛИМ, г.Коряжма

Трапезникова И.Н., Сиклицкий В.И.-- ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С-Петербург

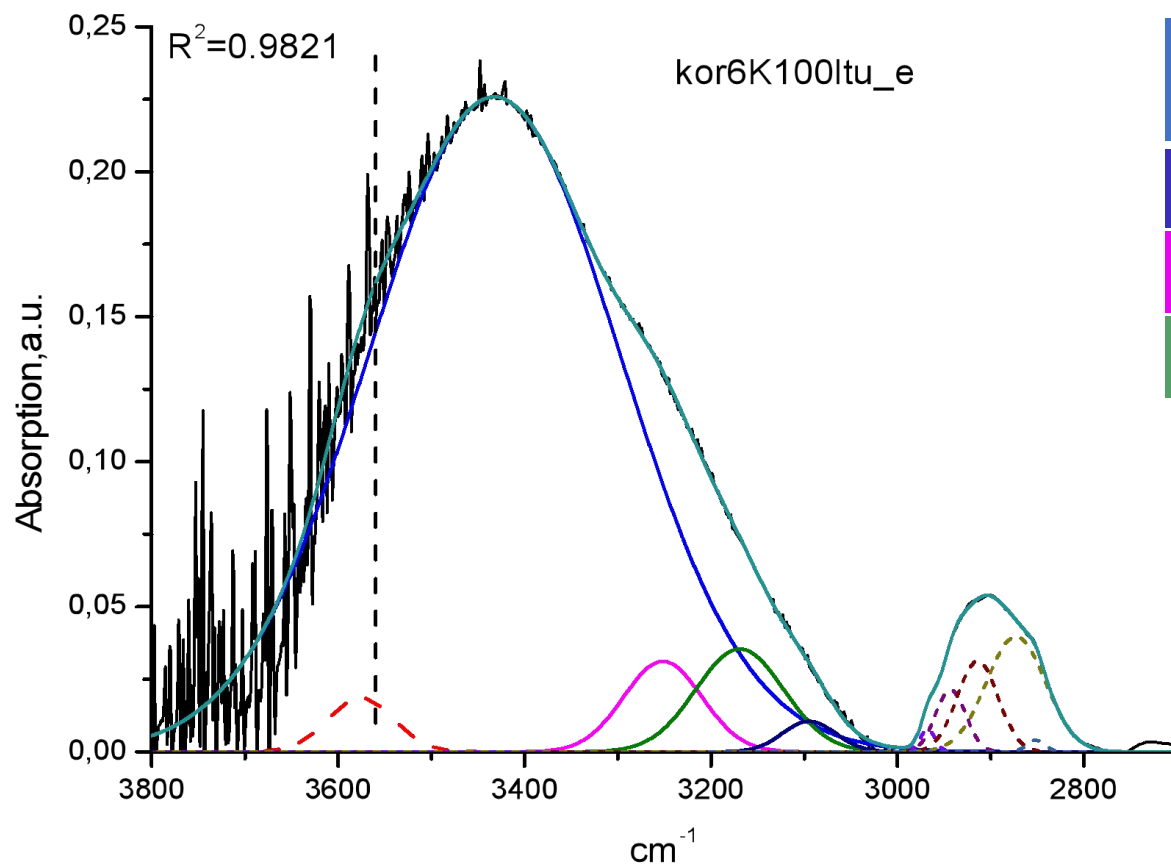
Ключевые моменты

- Теоретическая модель экспериментального спектра поглощения есть сумма 9 функций Гаусса с максимумами, соответствующими длинам характерных меж- и внутримолекулярных связей.
- Допустимый Коэффициентом корреляции между экспериментальным и модельным спектрами $R^2 > 0,98$.
- Исследовался ряд образцов флютинга (бумага для гофрирования), состоящие из смеси НСПЦ (нейтрально-сульфитной полуцеллюлозы) 90% березы с жесткостью 115 единиц Каппа) и 10% хвойной сульфатной небеленой целлюлозы (с жесткостью 80 единиц Каппа).
- показаны функции абсолютного отклонения экспериментальных спектров от расчетной модели для 2 и 3 съемки образца картона плотностью 100 г/см² пробы 2 и 3.
- Основной вклад в статистическую ошибку при расчете параметров модели определяет наличие воды в образце.

Исследуемые образцы крафт-бумаги
ПРОИЗВЕДЕННОЙ НА ЦЕЛЛЮЛЗНО- БУМАЖНОМ КОМБИНАТЕ ГРУППЫ "ИЛИМ", Г.
КОРЯЖМА

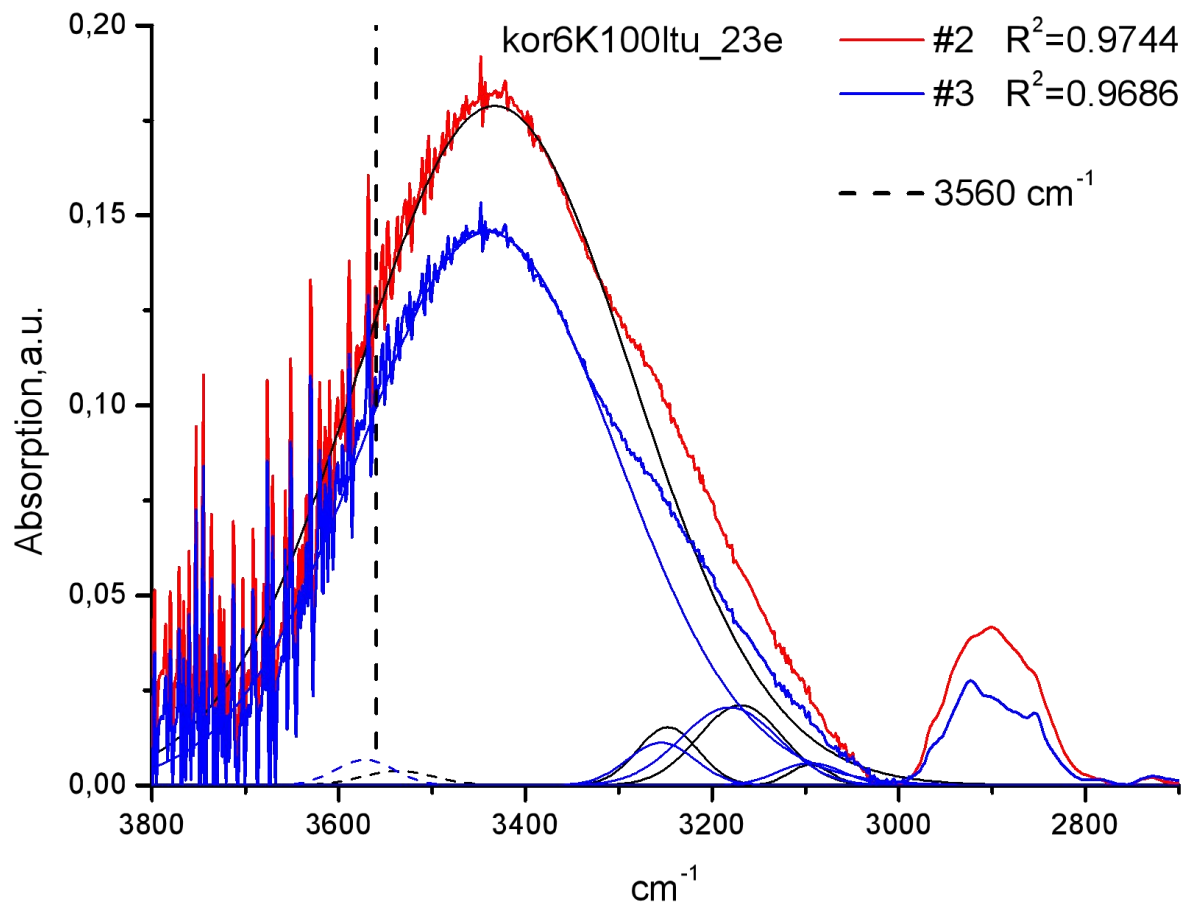
Название образца		
крафт К-100 г/см ² Коряжма	К-100 г/см ²	
Крафт Мешочная бумага 100 % хвоя	100 % хвоя (20 % сосны, 80% елка)	
крафт Б-90 г/см ² Коряжма	Б-90 г/см ²	
крафт Б-80 г/см ² Коряжма	Б-80 г/см ²	

Деконволюция (а) крафт-бумаги (Б-90 г/см², Коряжма)



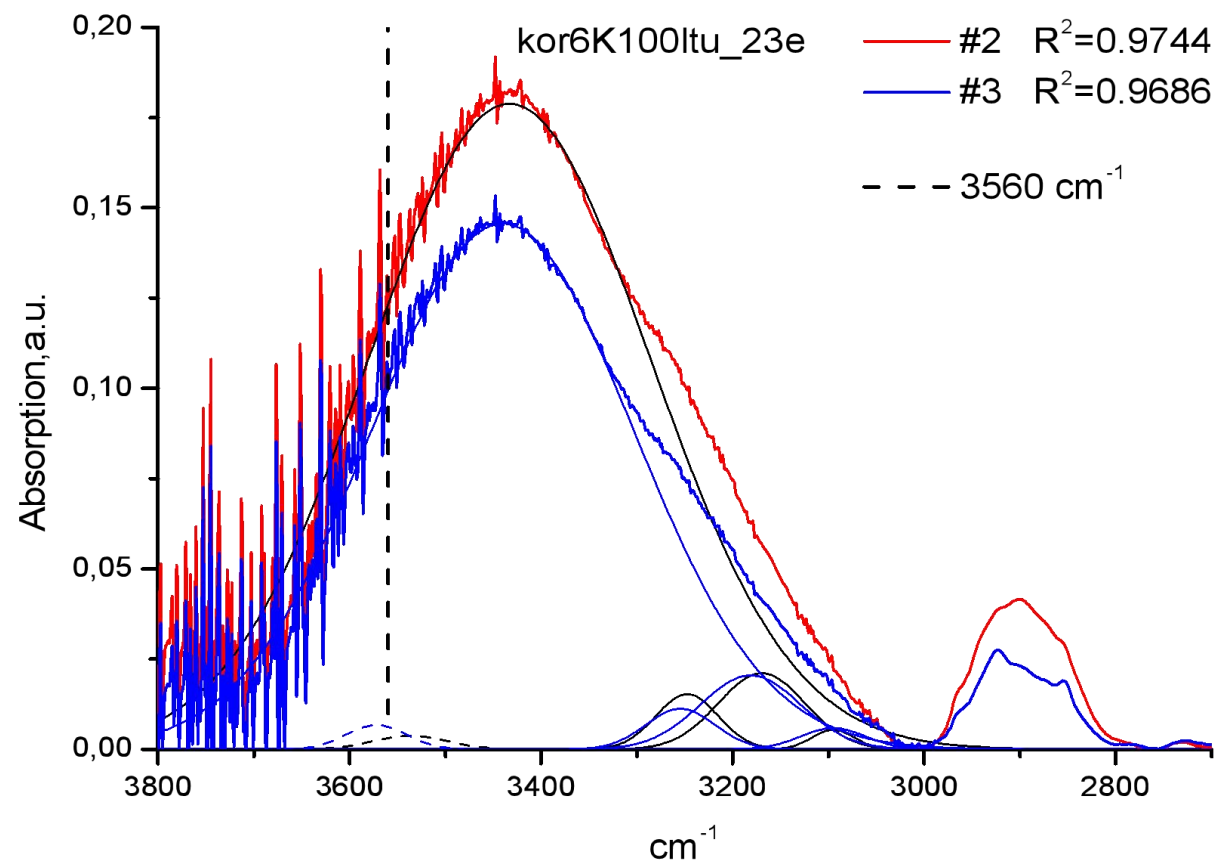
Энергия связи E	Длина связи d	Плотность связей	Тип водородной связи
6,09 кДж/моль	0,28 нм	76,37 %	внутримолекулярная
18,46 кДж/моль	0,27 нм	10 %	внутримолекулярная
22,59 кДж/моль	0,27 нм	2,27 %	Межмолекулярная

ИК-спектр поглощения образца картон с плотностью 100 г/см² (пробы с одного образца – линии 2,3)



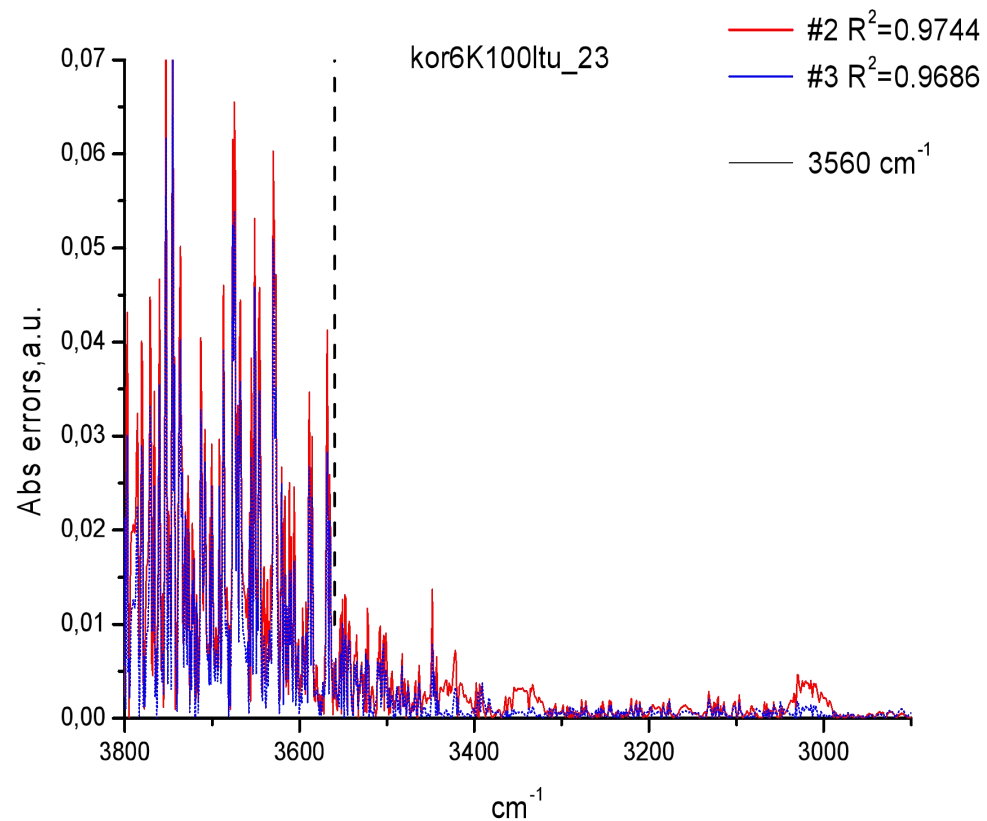
Энергия связи E	Длина связи d	Плотность связей	Тип водородной связи
??? кДж/моль	0,29 нм	64,47 %	внутримолекулярная
??? кДж/моль	0,27 нм	18,46 %	внутримолекулярная
??? кДж/моль	0,27 нм	1,50 %	Межмолекулярная

ИК-спектр поглощения образца картон с плотностью 100 г/см² (пробы с одного образца – линии 2,3)



Энергия связи E	Длина св язи d	Плотнос ть связей	Тип водородной связи
??? кДж/моль	0,29 нм	64,47 %	внутримолекулярная
??? кДж/моль	0,27 нм	18,46 %	внутримолекулярная
??? кДж/моль	0,27 нм	1,50 %	Межмолекулярная

Абсолютные отклонения экспериментальных спектров от расчетной модели для образца картона плотностью 100 г/см² пробы 2 и 3



Энергия, длина водородных связей (по формулам Е.Либовицкого)) и анализ вклада водородных связей

Название образца	Базовая частота	частота	сдвиг	Е кДж/моль	d, нм	плотность связей, %	Тип водородной связи
крафт К-100 г/см ² Коряжма проба 1	3560	3438±4	125±4	6,49±0,36	0,29	86±3	внутримолекул
		3252±4	309±3	17,74±0,41	0,27	2,3±1,0	внутримолекул
		3177±6	387±7	20,87±0,86	0,27	4,1±0,8	межмолекул
крафт Мешочная бумага 100 % хвоя (20 % сосны, 80 % елка) Коряжма	3560	3429	131	6,73	0,28	76,37	внутримолекул
		3237	323	18,95	0,27	10,00	внутримолекул
		3155	405	22,38	0,27	2,27	межмолекул
крафт Б-90 г/см ² Коряжма	3560	3437	123	6,09	0,29	64,47	внутримолекул
		3247	313	18,46	0,27	18,46	внутримолекул
		3149	411	22,59	0,27	1,50	межмолекул
крафт Б-80 г/см ² Коряжма	3560	3436	124	6,17	0,29	59,16	внутримолекул
		3252	308	18,21	0,27	21,38	внутримолекул

Результаты ИК -спектров измерения образца картона с плотностью 100 г/ см² с усреднением и погрешностью для трех проб измерений одного образца в интервале 2 месяца выдерживания образца.

Результаты (таблица 1) показывают, что энергия водородных связей, образующихся между О–Н-группами целлюлозы, находится в диапазоне 6-23 кДж/моль.



Таким образом, исследование ИК-спектров крафт-бумаги представляет интерес с целью прогнозирования свойств продукции ЦБП и улучшению качества продукции с заданными свойствами.



Адрес

СПб, Институтский пер., д.5



Сайт

www.spbftu.ru



Телефон

217-9-382

Спасибо за внимание !



Значки

Вы можете изменить размер этих значков, сохранив качество.

Вы можете изменить цвет обводки и заливки: нажмите на значок и во вкладке «Главное» выберите заливку и контур фигуры.



Значки

Вы можете изменить размер этих значков, сохранив качество.

Вы можете изменить цвет обводки и заливки: нажмите на значок и во вкладке «Главное» выберите заливку и контур фигуры.