

**СТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИТОВ
ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И СЕРЕБРА МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ**

Прусский А.И.⁽¹⁾, Громыко Д.В.⁽¹⁾, Токко О.В.⁽¹⁾, Котельникова Н.Е.⁽²⁾

⁽¹⁾ Петрозаводский государственный университет
185014, г. Петрозаводск, ул. Университетская, д. 10

⁽²⁾ Институт высокомолекулярных соединений РАН
199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр., д. 31

Методами рентгеноструктурного анализа и компьютерного моделирования исследована структура модифицированной атомами серебра порошковой целлюлозы (ПЦ), выделенной из листовенной лигноцеллюлозы. Методом полнопрофильного анализа определено, что исследуемый образец соответствует моноклинной фазе целлюлозы 1 β с антипараллельным расположением молекул. Периоды элементарной ячейки: $a = 7.881 \text{ \AA}$, $b = 7.837 \text{ \AA}$, $c = 10.603 \text{ \AA}$; угол моноклинности $\gamma = 95.63^\circ$, объем $V = 652 \text{ \AA}^3$. Для анализа надмолекулярной структуры образца методом Шеррера определены размеры областей когерентного рассеяния (ОКР). Установлено, что в направлении [100] наблюдается увеличение, а в направлении [001] – уменьшение ОКР по сравнению с ОКР порошковой лигноцеллюлозы. Площадь поперечного сечения фибриллы модифицированного образца в плоскости ab (980 \AA^2) на $\sim 8 \%$ больше площади фибриллы ПЦ. Показатель кристалличности (ПК), рассчитанный методом Руланда, составляет 79% , что на 7% больше ПК порошковой целлюлозы. Итоговый кластер композита ПЦ и серебра имеет формульную единицу $C_6O_5H_{10.12}Ag_{0.08}$.