

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

*Прусский А.И.<sup>(1)</sup>, Громыко Д.В.<sup>(1)</sup>, Токко О.В.<sup>(1)</sup>, Котельникова Н.Е.<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup> Петрозаводский государственный университет  
185014, г. Петрозаводск, ул. Университетская, д. 10

<sup>(2)</sup> 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 лиственной лигноцеллюлозы. Методом полнопрофильного анализа определено, что исследуемый образец соответствует моноклинной фазе целлюлозы 1 $\beta$  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  $ab$  ( $980 \text{ \AA}^2$ ) 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  $C_6O_5H_{10.12}Ag_{0.08}$ .