

нимуме через прослойку воды. При концентрации электролита более 150 мМ системы претерпевают золь-гель переход с формированием седиментационно-устойчивой во времени трехмерной структуры, для которой характерно обратимое разрушение (тиксотропия) в поле сдвиговой деформации. Системы с параллельной ориентацией частиц НКХ проявляют эффект двулучепреломления в потоке.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 16-13-10148).*

### **Список литературы**

1. Lin N., Huang J., Dufresne A. Preparation, properties and applications of polysaccharide nanocrystals in advanced functional nanomaterials: a review // *Nanoscale*. 2012. V. 4. P. 3274–3294.
2. Shen X., Shamshina J. L., Berton P., Gurauc G., Rogers R. D. Hydrogels based on cellulose and chitin: fabrication, properties, and applications // *Green Chem*. 2016. V. 18. P. 53–75.
3. Park B. K., Kim M. Applications of chitin and its derivatives in biological medicine // *Int. J. Mol. Sci*. 2010. V. 11. P. 5152–5164 .
4. Chang C., Zhang L. Cellulose-based hydrogels: present status and application prospects // *Carbohydrate Polymers*. 2011. V. 84. P. 40–53.

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАФИТОПОДОБНЫХ СТРУКТУРНЫХ ФРАГМЕНТОВ $g-C_3N_4$ С КОМПОНЕНТАМИ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ**

Матвеева К.В., Барташевич Е.В., Жеребцов Д.А.

*Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск*

*E-mail: mkv20.10@mail.ru*

Объектами исследования являются графеноподобные материалы, обладающие хорошими фотокаталитическими свойствами, и возможности их моделирования.

Цель работы – изучение возможностей образования слоевой упаковки графитоподобных структурных фрагментов  $g-C_3N_4$  с компонентами полициклических ароматических углеводородов.

С помощью комбинации методов молекулярной механики (ММ3+) и теории функционала плотности (B3LYP/6-311+(d, p)) были построены модели комплексов слоевой упаковки

различных полимерных фрагментов мелема (трехкомпонентный, восьмичленный и девятичленные циклы) с компонентами полициклических углеводов, таких как кубовый бордо  $C_{26}H_{12}O_2N_4$ , кубовый золотисто-желтый  $C_{24}H_{12}O_2$ , кубовый ярко-оранжевый  $C_{22}H_8O_2Br_2$ .

Вычислена энергия взаимодействия в комплексах молекул красителей с фрагментами мелема. Рассматриваются и сравниваются слоевые упаковки и стопочные мотивы. Анализируются свойства электронной плотности в области нековалентных взаимодействий в комплексах.

*Статья выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление №211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.А03.21.0011, и РФФИ, грант № 17-03-00406. «Концепция пниктогенных, халькогенных, галогенных и тетрельных связей в количественной оценке силы нековалентных взаимодействий в кристаллах».*

### **Список литературы**

1. Liu J. et.al. // Science. 2015. 347. 970–974.
2. Dong G., Y. Zhang, Q. Pan, J. Qiu. // J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Reviews. 2014. 20. 33–50.
3. Tay Q. et al. // J Chemistry of Materials. 2015. 35. 10. 11–16.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДОВ АЛЮМИНИЯ И ЖЕЛЕЗА**

Михайлов В.И. \*, Масленникова Т.П. \*\*, Кривошапкин П.В. \*, \*\*\*

*\*Институт химии Коми НЦ УрО РАН, г. Сыктывкар,*

*\*\*Институт химии силикатов РАН, г. Санкт-Петербург,*

*\*\*\*Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург*

*E-mail: system14@rambler.ru*

Загрязненная питьевая вода широко распространена, особенно в западном Китае и Индии, где грунтовые воды, как правило, содержат высокие концентрации токсичных соединений. Соединения Cr(VI) – это распространенные загрязнители природных вод, которые проявляют выраженный канцерогенный эффект и способны вызывать ряд других токсических эффектов. Органические красители, используемые в химической, текстильной и бумажной промышленности, также являются опасными загрязнителями окружающей среды. Так, мети-