

## Исследование надмолекулярных перестроек нативной целлюлозы на разных стадиях увлажнения

© Грунин<sup>1\*</sup> Юрий Борисович, Иванова<sup>1</sup> Мария Сергеевна, Грунина<sup>2</sup> Татьяна Юрьевна, Гогелашвили<sup>1</sup> Гоча Шотаевич и Масас<sup>1</sup> Дарья Сергеевна

<sup>1</sup> Кафедра физики. Поволжский государственный технологический университет.

Пл. Ленина, 3. г. Йошкар-Ола, 424006. Республика Марий Эл. Россия.

Тел.: (8362) 68-68-04. E-mail: [GruninYB@volgatech.net](mailto:GruninYB@volgatech.net)

<sup>2</sup> Кафедра биофизики. Московский государственный университет

им. М.В. Ломоносова. Ленинские горы, 3, стр.12. г. Москва, 119991. Россия.

Тел.: (495) 939-27-76. E-mail: [info@mail.bio.msu.ru](mailto:info@mail.bio.msu.ru)

\*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** целлюлоза, ЯМР-релаксация, адсорбция воды, степень кристалличности, удельная поверхность.

### Аннотация

На основе модернизированной схемы структурной организации микрофибрилл нативной целлюлозы показана возможность определения ее степени кристалличности, поперечных размеров кристаллитов, а также содержание элементарных фибрилл в составе микрофибрилл с использованием методов ЯМР <sup>1</sup>H и сорбционных измерений. Установлен механизм дефибриллирования целлюлозы на разных стадиях ее увлажнения, связанный с возникновением со стороны сконденсированной жидкости в микропорах расклинивающего давления, которое приводит к изменениям в ее надмолекулярной структуре. При этом происходит резкий рост скорости спин-решеточной релаксации системы «целлюлоза-вода» уже при малых влагосодержаниях, что объясняется образованием новых активных центров на границе формирующегося раздела с адсорбированными на них молекулами воды, которые ускоряют энергетический обмен протонной спин-системы с «решеткой». Этот процесс сопровождается уменьшением степени кристалличности образца на всех стадиях увлажнения целлюлозы. В работе установлен характер уменьшения поперечных размеров кристаллитов в рамках предлагаемой модели слоистой структуры целлюлозы. Показана возможность определения содержания элементарных фибрилл в микрофибрилле на основе данных о степени кристалличности целлюлозы. Рассмотрен процесс проникновения адсорбированных молекул воды в пространство между элементарными фибриллами в структуре микрофибриллы целлюлозы. Предложена схема образования монослойной адсорбции воды на активной поверхности целлюлозы, которая учитывает диполь-дипольное взаимодействие в системе «адсорбент-адсорбат», переходящее в формирование водородной связи. Высказана гипотеза об образовании V-структуры адсорбированной воды, когда указанная молекула взаимодействует с активным центром при образовании акцепторной водородной связи с гидроксильной группой при шестом атоме углерода. В соседнем глюкопиранозном кольце поверхностной цепочки целлюлозы молекула адсорбата формирует две донорные водородные связи с атомами кислорода гидроксильных групп при втором и третьем положениях атомов углерода.