

## **Анализ состояния воды, адсорбированной волокнами целлюлозы**

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

<sup>1</sup> Поволжский государственный технологический университет. пл. Ленина, 3.  
г. Йошкар-Ола, 424000. Россия. Тел.: (8362) 68-68-64.

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова.  
Ленинские горы, д. 1. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 939-10-00. E-mail: [GruninYB@volgatech.net](mailto:GruninYB@volgatech.net)

\*Ведущий направление; <sup>†</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** целлюлоза; надмолекулярная структура; адсорбция; ЯМР релаксация; система биополимер-вода; адсорбционный слой Гиббса.

### **Аннотация**

Предложена модернизированная модель слоистого строения микрофибрилл целлюлозы. Данная модель учитывает наличие щелевидных микропор в пространстве между элементарными фибриллами и микрофибриллами целлюлозы. Обсуждается характер формирования донорно-акцепторных внутри-, межмолекулярных и межслоевых водородных связей свойственных каждому глюкопиранозному звену целлюлозы. Описан механизм специфических адсорбционных взаимодействий молекул воды в монослое с активными центрами, располагающимися на гидрофильных поверхностях элементарных фибрилл. Обсуждается переход энергии диполь-дипольного взаимодействия в энергию водородной связи в ходе адсорбционного процесса между активными центрами целлюлозы и молекулами водного адсорбтива. Анализ диполь-дипольных взаимодействий молекул воды с поверхностными гидроксильными группами целлюлозы показал, что на расстоянии 2.5-3 Å энергия этого взаимодействия трансформируется в водородную связь. Обсуждается способ формирования донорно-акцепторных связей молекул воды с поверхностными гидроксильными группами целлюлозы. Методами протонной магнитной релаксации и сорбционных измерений определены термодинамические параметры, характеризующие состояние адсорбата в указанных слоях. Установлена возможность определения чистой теплоты адсорбции в бислое с учетом Аррениусовского характера времен корреляции тепловых молекулярных движений адсорбата. На основании уравнения Вант-Гоффа и определенной константы адсорбционного равновесия выявлено возрастание энтропии адсорбированной воды в ходе адсорбционного процесса. Расчетom установлено, что расстояние между ближайшими активными центрами целлюлозы составляет 6.5 Å. это приводит к разобщенности адсорбированных молекул воды и позволяет применять теории адсорбции Ленгмюра и БЭТ. Анализ зависимости времен спин-решеточной релаксации от влагосодержания целлюлозы позволил установить причину расклинивания ее кристаллитов со стороны адсорбированных молекул воды на начальных этапах адсорбции. Спад спин-решеточной релаксации однозначно указывает на процесс диспергирования целлюлозы на ее структурные элементы. Установлено, что при адсорбции часть внутренних областей кристаллитов переходит на их поверхность с участием гидроксильных групп целлюлозы, а при десорбции наблюдается обратный процесс.