

## **Возможности протонного магнитного резонанса в определении степени кристалличности целлюлозы**

© Грунин\*<sup>+</sup> Юрий Борисович и Иванова Мария Сергеевна

*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.*

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

**Ключевые слова:** целлюлоза, надмолекулярная структура, степень кристалличности, ядерный магнитный резонанс, время спин-решеточной релаксации, время спин-спиновой релаксации.

### **Аннотация**

Разработана слоистая модель структурной организации макрофибриллы нативной целлюлозы, состоящей из микрофибрилл, в состав которых входят элементарные фибриллы. Особенностью предлагаемой модели является наличие щелевидных пор между кристаллическими элементами целлюлозы. Установлено, что в среднем каждая молекула воды взаимодействует с одним глюкозным остатком поверхностных цепочек целлюлозы с образованием водородных связей в рамках монослойной адсорбции. Это позволяет установить корреляцию между степенью кристалличности целлюлозы и емкостью адсорбционного монослоя воды на ее активной поверхности. Исходя из условия быстрого молекулярного обмена между адсорбционными слоями воды в рамках теории Бломбергера-Парселла-Паунда, предложен подход для определения емкости монослоя воды. Получаемые значения согласуются с результатами решения уравнения Брунауэра-Эммета-Теллера для изотермы адсорбции воды на активной поверхности целлюлозы. Фурье преобразование сигнала спада свободной индукции целлюлозы позволяет установить степень ее кристалличности при различных значениях влагосодержаний. Разработаны способы оценки степени кристалличности разных видов сухой целлюлозы на основе ЯМР-релаксационных параметров – времени спин-решеточной релаксации и времени спин-спиновой релаксации. Используя метод дейтерирования целлюлозы, определены значения времен релаксации ее кристаллических областей. Результаты предварительных исследований показали, что степень кристалличности хлопковой целлюлозы имеет более высокое значение по сравнению с аналогичным параметром древесных видов целлюлозы. Сопоставление литературных и полученных нами данных с помощью <sup>1</sup>H-ЯМР-релаксации подтвердил возможность применения разработанных методов для решения задач научных исследований и проведения производственного контроля целлюлозных материалов на специализированных предприятиях.