

УДК 547.541.2

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2023.1.16

## ПРИМЕНЕНИЕ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ В ПРОЦЕССЕ РАСТВОРЕНИЯ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

© З. Н. Пашаева

*Институт нефтехимических процессов  
Министерства науки и образования Азербайджанской Республики  
Азербайджан, AZ1025 г. Баку, пр. Ходжалы, 30.*

*Email: ziyarechem@gmail.com*

*В статье представлен обзор результатов научных исследований в области изучения процесса растворения целлюлозы в присутствии ионных жидкостей. Целлюлоза представляет собой полисахарид, молекулы которого включают неразветвленные цепочки из остатков  $\beta$ -глюкозы, соединенных гликозидными связями  $\beta$ -(1 $\rightarrow$ 4). Она представляет собой белое твердое, стойкое вещество, не разрушается при нагревании (до 200 °С). Является горючим веществом с температурой разложения – 275 °С, температура самовоспламенения – 420 °С (хлопковая целлюлоза). Она нерастворима в воде, слабых кислотах и большинстве органических растворителей. Однако благодаря большому числу гидроксильных групп является гидрофильной (краевой угол смачивания составляет 20–30 градусов). Наиболее подходящими растворителями для целлюлозы являются ионные жидкости. Поэтому изучение процесса растворения целлюлозы в различных ионных жидкостях, определение оптимальных условий для этого процесса и поиск новых типов ионных жидкостей представляет важный как научный, так и практический интерес.*

**Ключевые слова:** *целлюлоза, ионные жидкости, процесс растворения, имидазолиевые ионные жидкости, степень полимеризации.*

Целлюлоза, самый распространенный природный полимер на Земле, находит широкое применение благодаря своим уникальным физическим и механическим свойствам. Природная кристаллическая структура целлюлозы (целлюлоза I) считается одним из основных факторов, ограничивающих ее потенциал с точки зрения производства конкурентоспособных по стоимости сортов [1]. В этой работе изучалось влияние обработки ионной жидкостью на кристаллическую структуру целлюлозы. Для растворения целлюлозы использовали две ионные жидкости на основе имидазола: 1-бутил-3-метил-1-имидазолия хлорид ([BMIM]Cl) и 1,3-метилимидазолия диметилсульфат ([BMIM][MeSO<sub>4</sub>]). Общая оценка указывает на неспособность ([BMIM][MeSO<sub>4</sub>]) растворять целлюлозу, тогда как [BMIM]Cl способен растворять целлюлозу. Это подтверждается и спектром <sup>13</sup>C-ЯМР. Исходная кристаллическая структура целлюлозы деформировалась до целлюлозы II, а степень кристалличности уменьшалась во время растворения и регенерации. Кроме того, процент кристалличности, толщина нанокристалла и энергия водородной связи уменьшались после растворения. Результаты показали, что кристалличность и толщина кристаллов были увеличены за счет регенерации методом постепенного охлаждения по сравнению с методом немедленного охлаждения.

Для удовлетворения растущего глобального спроса на энергию и снижения зависимости от традиционных ископаемых видов топлива значительный интерес вызывает возобновляемая биомасса, особенно целлюлоза [2]. Перед переработкой и преобразованием в ценные продукты целлюлозу необходимо предварительно обработать (растворить, а

затем регенерировать) экологически безопасным способом. Рассматриваемые как универсальные растворители, ионные жидкости (ИЖ) были тщательно исследованы на растворение/регенерацию целлюлозы. Однако основные механизмы растворения/регенерации целлюлозы в ИЖ остаются неясными, а ключевые управляющие факторы не полностью изучены на микроскопическом уровне. В этом обзоре обобщены недавние компьютерные исследования предварительной обработки целлюлозы, включая растворение целлюлозы в чистых ИЖ и смесях ИЖ/растворитель, а также регенерацию целлюлозы антирастворителями. Данные с атомным и временным разрешением позволяют микроскопически и фундаментально объяснить растворение/регенерацию целлюлозы, что необходимо для рационального скрининга и разработки новых ИЖ для эффективной предварительной обработки целлюлозы. Кроме того, обсуждаются проблемы будущих вычислительных исследований в этой области.

Для исследования механизма растворения и регенерации целлюлозы в ацетате 1-этил-3-метилимидазолия ([emim]Ac) и (1,4)-диметокси- $\beta$ -D-глюкозе были выполнены расчеты по теории функционала плотности и теории атомов в молекулах [3]. (Glc) был выбран в качестве модели для целлюлозы. Теоретические результаты показывают, что взаимодействие [emim]Ac с Glc сильнее, чем Glc с Glc. Дальнейшие исследования показывают, что ацетат аниона [emim]Ac образует прочные H-связи с гидроксильными группами Glc. Также найдено, что H-связи между [emim]Ac и Glc ослабляются или даже разрушаются при добавлении воды. Кроме

того, как исходные, так и регенерированные образцы целлюлозы были охарактеризованы с помощью методов FT-IR, XRD, TGA и SEM.

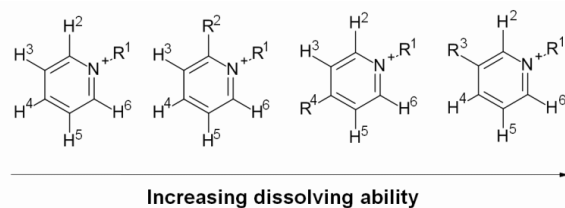
Специальные ионные жидкости (ИЖ) на основе карбоксилатов, а именно ацетат 1,3-диметилимидазолия ( $[C_1mim][CH_3COO]$ ) и гидроксилкарбоксилат 1,3-диметилимидазолия ( $[C_1mim][HOCH_2COO]$ ), были синтезированы и использованы в качестве растворителей для растворения целлюлозы [4]. Результаты показывают, что структура анионов оказывает существенное влияние на растворение целлюлозы; а при 120 °C растворимость целлюлозы в  $[C_1mim][CH_3COO]$  и  $[C_1mim][HOCH_2COO]$  может достигать 19.7 и 21.2% соответственно. Структура и термическая стабильность исходной и регенерированной целлюлозы были охарактеризованы методами инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье (FT-IR), рентгеновской дифракции (XRD) и термогравиметрического анализа (TGA). Эти результаты показывают, что две ионные жидкости являются непосредственным растворителем целлюлозы, а также указывают на то, что превращение целлюлозы I в аморфную целлюлозу происходит после процессов растворения и регенерации в ионных жидкостях. Более того, дальнейший анализ степени полимеризации (СП) регенерированной целлюлозы показывает, что температура и время растворения отрицательно влияют на СП целлюлозы; а более высокая температура растворения или более длительное время растворения обеспечивают более низкую СП регенерированной целлюлозы.

В работе [5] синтезированы ряд замещенных ацетатов пиперазиния, пиперидиния и пирролидиния. Высокоэффективные растворители целлюлозы были разработаны путем смешивания апротонного полярного растворителя, диметилсульфоксида (ДМСО), с синтезированными ионными жидкостями (ИЖ). Различные весовые соотношения соответствующих смешанных растворителей IL/DMSO были приготовлены для исследования влияния соразвителя на растворимость целлюлозы. Растворимость целлюлозы в системах растворителей IL/DMSO измеряли при 25, 50 и 80 °C. Было исследовано влияние таких факторов, как состав растворителя, температура процесса, тип катиона ИЖ и длина алкильной цепи катиона ИЖ, на растворимость целлюлозы. Среди всех испытанных растворителей смешанный растворитель N,N'-диметил-N-этилпиперазиния ацетат ( $[DMEPrpz][Ac]/DMSO$ ) демонстрирует наилучшие характеристики при растворении целлюлозы, достигая до 13.5 мас.% при 80 °C. Растворенную целлюлозу регенерировали, используя воду в качестве антирастворителя. Структуру и морфологию регенерированного целлюлозного материала охарактеризовали с помощью SEM, XRD и FTIR соответственно.

Показано [6], что растворение целлюлозной биомассы в ионных жидкостях (RTIL) при комнатной температуре изучается с помощью расчетов сво-

бодной энергии ее мономера, а именно – целлобиозы в рамках подхода моделирования молекулярной динамики. Рассчитана свободная энергия сольватации (СЭС) целлобиозы в ионных жидкостях, содержащих любой из семи различных анионов. Ранжирование этих жидкостей по SFE хорошо согласуется с экспериментальными данными по растворимости целлюлозы. Показано, что в растворении преобладает энтальпия, что коррелирует с прочностью межмолекулярной водородной связи между целлобиозой и анионами ИЖ.

Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований ионных жидкостей (ИЖ) на основе катионов 1-алкил-3-метилпиридиния и их растворов с целлюлозой [7]. Полученные результаты показывают корреляцию между химической структурой ИЖ и их способностью растворять целлюлозу. Обсуждается механизм сольватации природных полимеров в этих растворителях. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что ИЖ на основе пиридиния чрезвычайно перспективны для переработки биомассы. Эти результаты могут помочь в разработке растворителей с требуемыми физическими и химическими свойствами.



В работе [8] четыре растворителя целлюлозы, включая  $[C_2mim][CH_3COO] + DMSO$ ,  $[C_4mim][CH_3COO] + DMSO$ ,  $[C_6mim][CH_3COO] + DMSO$  и  $[C_8mim][CH_3COO] + DMSO$ , получали добавлением диметилсульфоксида ДМСО в ацетат 1-этил-3-метилимидазолия  $[C_2mim][CH_3COO]$ , ацетат 1-бутил-3-метилимидазолия  $[C_4mim][CH_3COO]$ , ацетат 1-гексил-3-метилимидазолия  $[C_6mim][CH_3COO]$  и ацетат 1-октил-3-метилимидазолия  $[C_8mim][CH_3COO]$  соответственно. Растворимость целлюлозы в этих растворителях определяли при 25 °C. Исследовано влияние длины алкильной цепи катиона имидазолия на растворимость целлюлозы. С увеличением длины алкильной цепи в катионе имидазолия растворимость целлюлозы увеличивается, но дальнейшее увеличение длины алкильной цепи приводит к уменьшению содержания целлюлозы.

Работа [9] направлена на синтез ионных жидкостей при комнатной температуре (RTIL) путем объединения катионов (например, олефинов и имидазолия на основе алкила) и анионов (фосфата и хлорида). Синтезированные RTIL показали значительную растворимость в пульпе в диапазоне температур от 35 до 100 °C по сравнению с типичными IL хлорида 1-бутил-3-метилимидазолия ( $BmimCl$ ), хлорида 1-этил-3-этилимидазолия ( $AeimCl$ ) и 1-метилэфир этил-3-метилимидазолия фосфора

(EminMeOPO<sub>2</sub>H). Смесь, состоящая из AcimCl и EminMeOPO<sub>2</sub>H, продемонстрировала значительное снижение растворимости пульпы по сравнению с одним из двух препаратов и RTIL. Анализ рентгеновской дифракции (XRD) показал, что анионы, вероятно, играют важную роль в декристаллизации целлюлозы в процессе растворения-регенерации. Термические свойства ИЖ исследовали с помощью термогравиметрического анализа (ТГА) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК).

Синтезированные ионные жидкости хлорид 1-бутил-3-метилимидазолия ([BMIM]Cl) и хлорид 1-аллил-3-метилимидазолия ([AMIM]Cl) использовали для обработки хлопковой целлюлозы с целью повышения эффективности ферментативного гидролиза [10]. Результаты показали, что концентрация восстанавливающего сахара в регенерированной хлопковой целлюлозе была улучшена до 41.47 и 41.99 г/л соответственно, при предварительной обработке [BMIM]Cl и [AMIM]Cl. Однако это было только 18.14 г/л для необработанной хлопковой целлюлозы. Было обнаружено, что растворяющая способность [AMIM]Cl была лучше, чем [BMIM]Cl при той же температуре. Их оптимальные температуры растворения составляли 180 и 170 °C соответственно, а максимальная растворимость хлопковой целлюлозы составляла 19%. Снимки сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) показали, что поверхности регенерированной целлюлозы, обработанной ионными жидкостями, становились шероховатыми, а плотная регулярная структура оригинала нарушалась. Рентгеновская дифрактометрия (XRD) показала, что размер кристаллов регенерированной хлопковой целлюлозы значительно уменьшился, что указывает на снижение кристалличности целлюлозы из-за воздействия ионных жидкостей.

В работе [11] взаимодействия целлюлозы с ионными жидкостями изучались калориметрически и с помощью оптической микроскопии для двух новых ионных жидкостей (1,5-диазабицикло[4.3.0]нон-5-ений пропионат и *N*-метил-1,5-диазабицикло[4.3.0]нон-5-ений диметилфосфат). В качестве растворителей использовали смеси 1-этил-3-метилимидазолия и ацетат-вода. Оптическая микроскопия служила для определения степени растворения и идентификации картины растворения образца целлюлозы. Калориметрические исследования выявили пик, относящийся к растворению целлюлозы в растворителе. Однако этот переход указывал не на полное растворение, а, скорее, на растворение внутри волокна или фибрилл. Этот метод был использован для изучения различий между четырьмя образцами целлюлозы с различной предварительной обработкой или происхождением.

Впервые показано [12], что гуанидина акрилат и метакрилат могут выступать в качестве ионных жидкостей для прямого растворения целлюлозы (растворимость диальдегидцеллюлозы составляет 27% при температуре 60 °C). Установлены условия

использования новых ионных жидкостей в качестве растворителя диальдегидцеллюлозы: температура (60 °C), концентрация водного раствора акрилата (метакрилата) гуанидина (1 моль/л).

Изучено растворение целлюлозных волокон льна в ионной жидкости 1-этил-3-метилимидазолия ацетата ([C<sub>2</sub>mim][OAc]) с соразвителем диметилсульфоксидом (ДМСО). Волокна погружали в смеси ионная жидкость/ДМСО при различных температурах на определенное время растворения, а затем коагулировали в воде. После сушки поперечные сечения волокон анализировали с помощью оптического микроскопа, который использовали для отслеживания доли коагулированного волокна. Установлено, что температурная зависимость этой коагулированной фракции подчиняется уравнению Аррениуса с единичной энергией активации 100±10 кДж/моль. Примечательно, что это значение не зависит от массовой доли используемого ДМСО. Эта работа дает количественную оценку композиции по максимальной скорости растворения, которая возникает при равной массовой доле ДМСО и [C<sub>2</sub>mim][OAc].

Сообщается [14], что солома содержит большое количество целлюлозы и может использоваться в качестве сырья для производства целлюлозного этанола. Из-за большого количества меж- и внутримолекулярных водородных связей целлюлозы она нерастворима в обычных растворителях, что сильно ограничивает конверсию и использование целлюлозы. Ионные жидкости с более низкой температурой плавления и меньшей вязкостью хорошо растворяются в целлюлозе, поэтому в последние годы они широко используются для предварительной обработки целлюлозы. Изучение взаимосвязи между структурой ионных жидкостей и их растворяющими свойствами для целлюлозы необходимо для разработки новых эффективных ионных жидкостей. Большое разнообразие ионных жидкостей и сложная структура целлюлозы привели к медленному прогрессу в изучении механизмов сольволизации целлюлозы в ионных жидкостях.

Обзорная работа [15] посвящена оценке растворителей для растворения целлюлозы и механизму регенерации растворенного биополимера. В качестве растворителей представляют интерес ионные жидкости на основе имидазола, четвертичные аммониевые электролиты, соли супероснований и их бинарные смеси с молекулярными растворителями. Авторы кратко обсудили механизм растворения целлюлозы и рассмотрели стратегии оценки эффективности растворителя исходя из его физико-химических свойств. В дополнение к благоприятному эффекту более низкой реологии раствора целлюлозы определяющими факторами растворения целлюлозы являются микроскопические свойства растворителя/раствора, включая эмпирическую полярность, кислотность по Льюису, основность по Льюису и дипольность/поляризуемость. Также авторы

обсуждают, как эти микроскопические свойства рассчитываются из спектров УФ-видимой области сольватохромных зондов и их использование для объяснения наблюдаемого порядка эффективности растворителя.

Изучению процесса растворения целлюлозы в присутствии ионных жидкостей также посвящены работы [16–24]. Кроме того, ионные жидкости также были применены и в наших исследованиях [25–27].

Таким образом, представленный обзор результатов научных исследований в области изучения процесса растворения целлюлозы в присутствии ионных жидкостей показывает, что научный интерес к этому процессу не ослабевает и по сегодняшний день. Исследования в этой области создают хорошие предпосылки по выявлению новых системных ионных жидкостей для процесса растворения целлюлозы и поиску, и определению оптимальных условий для этих процессов.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Marvast E. H., Abdulkhani A., Karimi A., Hamzeh Y. Study on Dissolution and Regeneration of Cellulose with Two Types of Ionic Liquids // *Journal of Forest and Wood Product*. 2014. Vol. 67. N 1. P. 93–103.
2. Gupta K. M., Jiang J. Cellulose dissolution and regeneration in ionic liquids: A computational perspective // *Chemical Engineering Science*. 2015. Vol. 121. P. 180–189.
3. Ding Z-D., Zhen C., Wenxiu G., Sheng M. Theoretical and experimental investigation on dissolution and regeneration of cellulose in ionic liquid // *Carbohydrate Polymers*. 2012. Vol. 89. N 1. P. 7–16.
4. Hao M. A., Mejin L., Fan X., Juhjiang L. Dissolution of Cellulose in Carboxylate-Based Task-Specific Ionic Liquids // *Chinese Journal of Applied Chemistry*. 2018. Vol. 35. N 4. P. 449–456.
5. Kasprzak D., Krystkowiak E., Stepniak I., Galinski M. Dissolution of cellulose in novel carboxylate-based ionic liquids and dimethyl sulfoxide mixed solvents // *European Polymer Journal*. 2019. Vol. 113. N 3. P. 72–81.
6. Payal R., Bejagam K., Mondal A., Balasubrahmanian S. Dissolution of Cellulose in Room Temperature Ionic Liquids: Anion Dependence // *J. Phys. Chem. B*. 2015. Vol. 119. N 4. P. 1654–1650.
7. Sashina E. S., Kashirskii D. A., Busygin K. N. Dissolution of cellulose with pyridinium-based ionic liquids: Effect of chemical structure and interaction mechanism // *Cellulose Chemistry and Technology*. 2016. Vol. 50. N 2. P. 199–211.
8. Airong X., Cao L., Wang B., Junjing M. Dissolution Behavior of Cellulose in IL + DMSO Solvent: Effect of Alkyl Length in Imidazolium Cation on Cellulose Dissolution // *Advances in Materials Science and Engineering*. 2015. Vol. 8. P. 1–4.
9. Meng R., Jinbo C., Detao L., Kunfeng X. Dissolution of Pulp in Room-Temperature Ionic Liquids: A Comparative Study // *Wood and Fiber Science*. 2014. Vol. 46. N 2. P. 206–215.
10. Xing L., Zijian W., Gong G. Dissolution of Cotton Cellulose with Ionic Liquids 1-Butyl-3-Methylimidazolium Chloride and 1-Allyl-3-Methylimidazolium Chloride to Prepare Reducing Sugar // *Journal of Energy Engineering*. 2014. Vol. 140. N 2. P. 4013013–4013021.
11. Parvalainen A., Virtanen T., Kilpelainen I., Ahvenainen P. Dissolution enthalpies of cellulose in ionic liquids // *Carbohydrate Polymers*. 2014. Vol. 113. N 11. P. 67–76.
12. Khashirova S. Yu., Zhansitov A. A., Isupova Z. Yu., Elcheparova S. A. Acrylate and Methacrylate Guanidine-Ionic Liquids for Dissolution of Cellulose // *Materials Science Forum*. 2018. P. 45–48.
13. Hawkins E. J., Liang Y., Eria M., Hine P. J. Time temperature superposition of the dissolution of cellulose fibres by the ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate with cosolvent dimethyl sulfoxide // *Carbohydrate Polymers Technologies and Applications*. 2021. Vol. 2. N 12. P. 100021–100032.
14. Junfeng L., Ningning L. Study on the dissolution mechanism of cellulose in ionic liquids with coarse-grained force field // *Theoretical and Computational Chemistry*. 2022. N 1. P. 1–17.
15. Seoud O., Kostaq M., Jedvert K., Malek N. Cellulose in Ionic Liquids and Alkaline Solutions: Advances in the Mechanisms of Biopolymer Dissolution and Regeneration // *Polymers*. 2019. Vol. 11. N 12. P. 1917–1933.
16. Damayanti L. A., Fatimah S. S., Widhiyanti T. Pre-service chemistry teachers' conceptions of ionic liquids as ionic solvents on the cellulose dissolution process // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1521. P. 145–149.
17. Renqing L., Lin J., Zhao X. Theoretical study on interactions between ionic liquid and chitin/chitosan/cellulose // *Journal of Chilean Chemical Society*. 2017. Vol. 62. N 4. P. 717–725.
18. Hina S., Zhang Y., Wang H. Role of ionic liquids in dissolution and regeneration of cellulose // *Rev. Adv. Mater. Sci*. 2015. Vol. 40. P. 215–226.
19. Lefroy K., Murray B. S., Ries M. Effect of Oil on Cellulose Dissolution in the Ionic Liquid 1-Butyl-3-methyl Imidazolium Acetate // *ACS Omega*. 2022. Vol. 7. N 42. P. 37532–37545.
20. Hanbin L., Sale K., Holmes B., Simmons B. Understanding the Interactions of Cellulose with Ionic Liquids: A Molecular Dynamics Study // *J. Phys. Chem. B*. 2010. Vol. 114. N 12. P. 4293–4301.
21. Stolarska O., Pawlowska-Zygarowicz A., Soto A., Rodriguez S. Mixtures of ionic liquids as more efficient media for cellulose dissolution // *Carbohydrate Polymers*. 2017. Vol. 178. N 12. P. 277–285.
22. Pat. WO 2003029329. 2003 Dissolution and processing of cellulose using ionic liquids / R. P. Swatloski, R. D. Rogers, J. D. Holbrey.
23. Airong X., Wang Y., Rukuan L. Cellulose dissolution in diallylimidazolium methoxyacetate + N-methylpyrrolidinone mixture // *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. P. 11518–11519.
24. Shamsuri A. A., Jamil S., Abdan Kh. Nanocellulose Extraction Using Ionic Liquids: Syntheses, Processes, and Properties // *Frontiers in MaTERIALS*. 2022. N 9. P. 237–241.
25. Пашаева З. Н. Применение хиральных ионных жидкостей в органическом синтезе // *Вестник Башкирского гос. пед. ун-та*. 2021. №4. С. 116–124.
26. Пашаева З. Н. Ионные жидкости на основе (-)-ментола // *Вестник Башкирского гос. пед. ун-та*. 2022. №1. С. 146–152.
27. Ибрагимова М. Д., Нагиев В. А., Пашаева З. Н., Сеидова С. А., Абдуллаева Ф. М., Ахмедбекова С. Ф., Абдуллаева Х. А. Синтез ионных жидкостей на основе муравьиной и уксусной кислоты и физико-химические методы их исследования // *Qafqaz Universiteti*. 2016. №1. С. 101–107.

Поступила в редакцию 23.01.2023 г.

После доработки – 22.02.2023 г.

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2023.1.16

## APPLICATION OF IONIC LIQUIDS IN THE PROCESS OF DISSOLVING CELLULOSE

© Z. N. Pashaeva

*Institute of Petrochemical Processes  
30 Khodjaly Avenue, AZ 1025 Baku, Republic of Azerbaijan.*

*Email: ziyarechem@gmail.com*

In the article, an overview of the results of scientific research in the field of studying the process of dissolving cellulose in the presence of ionic liquids is given. Cellulose is a polysaccharide whose molecules include unbranched chains of  $\beta$ -glucose residues linked by  $\beta$ -(1 $\rightarrow$ 4) glycosidic bonds. It is a white solid stable substance that does not break down when heated (up to 200 °C). It is a combustible substance with a decomposition temperature of 275 °C, an auto-ignition temperature of 420 °C (cotton cellulose). It is insoluble in water, weak acids and most organic solvents. However, due to the large number of hydroxyl groups, it is hydrophilic (the contact angle is 20–30 degrees). The most suitable solvents for cellulose are ionic liquids. Therefore, the study of the dissolution of cellulose in various ionic liquids, the determination of optimal conditions for this process and the search for new types of ionic liquids is of great scientific and practical interest. Cellulose, the most abundant natural polymer on Earth, is widely used due to its unique physical and mechanical properties. The natural crystal structure of cellulose (cellulose I) is considered one of the main factors limiting its potential to produce cost-competitive varieties. It is shown that the dissolution of cellulosic biomass in ionic liquids (RTIL) at room temperature is studied by calculating the free energy of its monomer, namely cellobiose, within the molecular dynamics modeling approach. To meet the growing global energy demand and reduce dependence on traditional fossil fuels, renewable biomass, especially cellulose, is of considerable interest. Before being processed and converted into valuable products, cellulose must be pre-treated (dissolved and then re-generated) in an environmentally friendly manner.

**Keywords:** cellulose, ionic liquids, dissolution process, imidazolium ionic liquids, degree of polymerization.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at [bulletin\\_bsu@mail.ru](mailto:bulletin_bsu@mail.ru) if you need translation of the article.

1. Marvast E. H., Abdulkhani A., Karimi A., Hamzeh Y. *Journal of Forest and Wood Product*. 2014. Vol. 67. N 1. Pp. 93–103.
2. Gupta K. M., Jiang J. *Chemical Engineering Science*. 2015. Vol. 121. Pp. 180–189.
3. Ding Z.-D., Zhen C., Wenxiu G., Sheng M. *Carbohydrate Polymers*. 2012. Vol. 89. N 1. Pp. 7–16.
4. Hao M. A., Mejlin L., Fan X., Juhjiang L. *Chinese Journal of Applied Chemistry*. 2018. Vol. 35. N 4. Pp. 449–456.
5. Kasprzak D., Krystkowiak E., Stepniak I., Galinski M. *European Polymer Journal*. 2019. Vol. 113. N 3. Pp. 72–81.
6. Payal R., Bejagam K., Mondal A. *J. Phys. Chem. B*. 2015. Vol. 119. N 4. Pp. 1654–1650.
7. Sashina E. S., Kashirskii D. A., Busygin K. N. *Cellulose Chemistry and Technology*. 2016. Vol. 50. N 2. Pp. 199–211.
8. Airong X., Cao L., Wang B., Junjing M. *Advances in Materials Science and Engineering*. 2015. Vol. 8. Pp. 1–4.
9. Meng R., Jinbo C., Detao L., Kunfeng X. *Wood and Fiber Science*. 2014. Vol. 46. N 2. Pp. 206–215.
10. Xing L., Zijian W., Gong G. *Journal of Energy Engineering*. 2014. Vol. 140. N 2. Pp. 4013013–4013021.
11. Parvalainen A., Virtanen T., Kilpelainen I., Ahvenainen P. *Carbohydrate Polymers*. 2014. Vol. 113. N 11. Pp. 67–76.
12. Khashirova S. Yu., Zhansitov A. A., Isupova Z. Yu., Elcheparova S. A. *Materials Science Forum*. 2018. Pp. 45–48.
13. Hawkins E. J., Liang Y., Eria M., Hine P. *J. Carbohydrate Polymers Technologies and Applications*. 2021. Vol. 2. N 12. Pp. 100021–100032.
14. Junfeng L., Ningning L. *Theoretical and Computational Chemistry*. 2022. N 1. Pp. 1–17.
15. Seoud O., Kostaq M., Jedvert K., Malek N. *Polymers*. 2019. Vol. 11. N 12. Pp. 1917–1933.
16. Damayanti L. A., Fatimah S. S., Widhiyanti T. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1521. Pp. 145–149.
17. Renqing L., Lin J., Zhao X. *Journal of Chilean Chemical Society*. 2017. Vol. 62. N 4. Pp. 717–725.
18. Hina S., Zhang Y., Wang H. *Rev. Adv. Mater. Sci*. 2015. Vol. 40. Pp. 215–226.
19. Lefroy K., Murray B. S., Ries M. *ACS Omega*. 2022. Vol. 7. N 42. Pp. 37532–37545.
20. Hanbin L., Sale K., Holmes B., Simmons B. *J. Phys. Chem. B*. 2010. Vol. 114. N 12. Pp. 4293–4301.
21. Stolarska O. *Carbohydrate Polymers*. 2017. Vol. 178. N 12. Pp. 277–285.
22. Pat. WO 2003029329. 2003 Dissolution and processing of cellulose using ionic liquids / R. P. Swatloski, R. D. Rogers, J. D. Holbrey.
23. Airong X., Wang Y., Rukuan L. *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. Pp. 11518–11519.
24. Shamsuri A. A., Jamil S., Abdan Kh. *Frontiers in MaTERIALS*. 2022. N 9. Pp. 237–241.
25. Pashaeva Z. N. *Vestnik Bashkirskogo gos. ped. un-ta*. 2021. No. 4. Pp. 116–124.
26. Pashaeva Z. N. *Vestnik Bashkirskogo gos. ped. un-ta*. 2022. No. 1. Pp. 146–152.
27. Ibragimova M. D., Nagiev V. A., Pashaeva Z. N., Seidova S. A., Abdullaeva F. M., Akhmedbekova S. F., Abdullaeva Kh. A. *Qafqaz Universiteti*. 2016. No. 1. Pp. 101–107.

*Received 23.01.2023.*

*Revised 22.02.2023.*