

Projeto para o Programa PIBIC/CNPq

Funcionalização de nanocristais de celulose com organosilanos

Pesquisadora Responsável: Rubia Figueredo Gouveia

Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano)

Introdução

A celulose é o biopolímero mais abundante na Terra e o principal constituinte das plantas.^[1,2] Suas cadeias lineares possuem regiões amorfas e cristalinas que interagem por ligações de hidrogênio formando as fibras.^[2] Por sua abundância, biodegradabilidade, baixo custo, leveza, excelente propriedade mecânica e potencial de funcionalização, as fibras de celulose podem ser utilizadas na indústria automotiva, liberação de fármacos, engenharia de tecidos, embalagens, dispositivos eletrônicos, adsorção de contaminantes, entre outras aplicações.^[1-4]

As formas mais comumente utilizadas são as nanofibras de celulose (CNFs) e os nanocristais de celulose (CNCs). As CNFs possuem parte amorfa e cristalina e são obtidas através do destacamento das fibras, num processo conhecido como fibrilação.^[5] Já os CNCs possuem apenas a porção cristalina do polímero e são obtidos através de um processo químico na presença de um ácido.^[6] A vantagem de empregar materiais na escala nano está em possuírem uma área superficial maior, o que possibilita o seu uso em menor quantia para obter propriedades similares aos de escala macro.

Devido a sua intrínseca hidrofobicidade, o uso da celulose tal qual se torna inviável para inúmeras aplicações. Portanto, inúmeras modificações químicas que empregam ácidos minerais ou orgânicos, bases, agentes oxidantes, polímeros ou uso de componentes orgânicos têm sido estudadas para aumentar a hidrofobicidade da celulose.^[1-6] Entre elas, está o uso de organosilanos.^[4,7-9]

Os organosilanos são compostos em que um átomo de silício faz quatro ligações com grupos funcionais, sendo estes divididos em até três grupos alcóxi (OR') e pelo menos um grupo funcional (R), na seguinte fórmula geral $(R)_x\text{-Si}(\text{OR}')_{4-x}$, $x > 1$. Os grupos alcóxi (OR') reagem com hidroxilas da celulose e são os responsáveis pela formação de uma ligação covalente (O-Si-O) com a superfície da mesma. Já os grupos funcionais (R) não são substituídos mesmo após reação com a celulose e são os responsáveis por conferir a hidrofobicidade para superfície.^[3]

Dado a grande variedade de grupos funcionais que podem ser utilizados, a gama de propriedades que os organosilanos podem conferir a celulose é muito vasta.^[3,7-9] Os grupos funcionais podem ser cadeias carbônicas curtas ou longas^[4,8,9], podem conferir rugosidades diferentes a superfície^[7] e podem ainda trazer grupos que possam reagir com uma cadeia polimérica em um compósito.^[8]

Objetivos

Otimizar a metodologia de funcionalização de nanocristais de celulose (CNCs) empregando dois organosilanos diferentes.

Objetivos Específicos:

- 1) Investigar a influência do pH, temperatura, proporção dos solventes (álcool/água) e tempo na reação de cada organosilano.
- 2) Determinar a melhor condição de reação para cada organosilano.
- 2) Caracterização química e morfológica dos nanocristais de celulose (CNCs) modificados.

Metodologia

Com o intuito de tornar os nanocristais de celulose (CNCs) hidrofóbicos, eles serão funcionalizados com dois organosilanos diferentes. Em ambos reagentes o grupo funcional (R) será uma cadeia carbônica, curta em um reagente e longa no outro. A propriedade térmica dos CNCs será avaliada por termogravimetria (TGA). A morfologia dos CNCs será avaliada por microscopia de força atômica (AFM). Para averiguar a composição química da superfície dos CNCs, eles serão avaliados por espectroscopias de infravermelho (FTIR) e de fotoelétrons excitados por raios X (XPS). Para averiguar a hidrofobicidade da superfície, o ângulo de contato de filmes de CNCs será avaliado.

Referências Bibliográficas

- [1] Abushammala, H.; Mao, J., *A Review of the Surface Modification of Cellulose and Nanocellulose Using Aliphatic and Aromatic Mono- and Di-Isocyanates*, **Molecules**, 2019, 24, 2782.
- [2] Hokkanen, S.; Bhatnagar, A.; Sillanpaa, M., *A review on modification methods to cellulose-based adsorbents to improve adsorption capacity*, **Water Research**, 2016, 91, 156-173.
- [3] Abdelmouleh, M. *et al.*, *Interaction of Silane Coupling Agents with Cellulose*, **Langmuir**, 2002, 18, 3203-3208.

- [4] Belgacem, M.N.; Gandini, A., *Surface Modification of Cellulose Fibres*, **Polímeros: Ciência e Tecnologia**, 2005, 15 (2), 114-121.
- [5] Missoum, K.; Belgacem, M. N.; Bras, J., *Nanofibrillated Cellulose Surface Modification: A Review*, **Materials**, 2013, 6, 1745-1766.
- [6] Pech-Cohuo, S.C. *et al.*, *Production and Modification of Cellulose Nanocrystals from Agave tequilana Weber Waste and Its Effect on the Melt Rheology of PLA*, **Hindawi International Journal of Polymer Science**, 2018.
- [7] Cunha, A. G. *et al.*, *Surface Structuring and Water Interactions of Nanocellulose Filaments Modified with Organosilanes toward Wearable Materials*, **ACS Applied Nano Materials**, 2018, 1, 5279–5288.
- [8] Yanjun, X. *et al.*, *Silane coupling agents used for natural fiber/polymer composites: A review*, **Composites**, 2010, Part A 41, 806–819.
- [9] Ding, B. *et al.*, *Conversion of an electrospun nanofibrous cellulose acetate mat from a super-hydrophilic to super-hydrophobic surface*, **Nanotechnology**, 2006, 17, 4332–4339.