

## Projeto para o Programa PIBIC/CNPem

# Interações moleculares e nanométricas em materiais híbridos de óxido de grafeno e lignina

**Dr. Mathias Strauss – Divisão de Nanobiotecnologia/LNNano**

### Introdução

Os materiais híbridos são uma classe especial de compostos, obtidos pela combinação entre dois ou mais materiais distintos, e que no âmbito da nanotecnologia têm recebido muita atenção nos últimos anos. A interação desses materiais em escala molecular, para a formação do nanocompósito híbridos promove o sinergismo entre as propriedades destes componentes podendo produzir materiais com características e propriedades únicas e diferenciadas que não são encontradas nos componentes isolados. Essas particularidades dos materiais híbridos podem então ser empregadas nas mais diversas aplicações explorando a melhoria de propriedades mecânicas, térmicas, química, texturais, morfológicas, elétricas, entre outras.

Dos nanomateriais com grande potencial tecnológico destacam-se o grafeno e seus derivados. O grafeno consiste em uma folha plana de átomos de carbono com hibridização  $sp^2$  em arranjo hexagonal. É um material extremamente forte mecanicamente, leve, quase transparente, um excelente condutor de calor e eletricidade; propriedades que são exploradas nas mais diversas aplicações da eletrônica quântica até a agricultura passando por polímeros estruturais. Já das biomoléculas estudadas para aplicações avançadas a lignina é uma das mais promissoras. A lignina é uma macromolécula encontrada nas plantas terrestres, associada à celulose na parede celular (18% e 35% da massa seca da parede celular dos vegetais) cuja função é de conferir rigidez, impermeabilidade e resistência a ataques microbiológicos e mecânicos aos tecidos vegetais. Ela é um subproduto e resíduo de grande volume de importantes processos agroindustriais de produção de papel e celulose e também do etanol celulósico (etanol 2G).

Com o objetivo de oferecer uma destinação de maior valor agregado e alto potencial tecnológico para a lignina umas das opções é utilizá-la na obtenção de materiais híbridos. Sua associação com derivados de grafeno desponta como uma interessante alternativa dado o potencial da combinação sinérgica das propriedades de ambos os materiais. Materiais híbridos de derivados de grafeno-lignina devem apresentar características interessantes que permitirão

o seu uso em aplicações em remediação ambiental, agricultura, materiais estruturais, entre outras.

No entanto, a obtenção destes materiais híbridos e controle das suas propriedades para as aplicações alvo passa obrigatoriamente pela compreensão profunda e detalhada das interações desses materiais em escala molecular e nanométrica. É necessário gerar conhecimento científico a respeito das interações nestes materiais híbridos que correlacionem as propriedades individuais de cada um dos seus componentes, as condições estabelecidas durante a sua combinação e as características do material resultante usando para isso um ferramental avançado e integrado de técnicas de caracterização.

## **Objetivos**

Aprofundar o conhecimento a respeito das interações existentes em materiais híbridos de derivados de grafeno e lignina em escala molecular e nanométrica estabelecendo as correlações entre as propriedades individuais de cada um dos seus componentes, as condições estabelecidas durante a sua combinação e as características do material resultante.

## **Objetivos específicos**

- i) Obter amostras de óxido de grafeno com diferentes características químicas e morfológicas, e amostras de lignina de diferentes origens.
- ii) Estudar a interação em escala molecular e nanométrica entre estes óxidos de grafeno e ligninas em diferentes condições.
- iii) Determinar as propriedades físico-químicas dos materiais híbridos formados.

## **Métodos**

Preparação das amostras de óxido de grafeno e lignina:

- a) As amostras de óxido de grafeno com diferentes características químicas e morfológicas serão obtidas pela rota de Hümmer, realizando a variação no grau de oxidação usando processos químicos de redução em solução e procedimentos de separação de tamanho dos flakes por centrifugação.
- b) As ligninas de diferentes origens serão obtidas a partir de tratamentos químicos e/ou enzimáticos de bagaço de cana-de-açúcar e/ou eucalipto, ou de amostras comerciais.

Interação óxidos de grafeno e lignina:

- c) As amostras de óxido de grafeno e lignina serão colocadas em contato em solução tomando como parâmetro condições de boa dispersão e de solubilidades destes. Serão controlados tempos de exposição, concentrações totais e relativas dos componentes, temperatura, pH, força iônica e outros parâmetros que possam afetar a interação entre os componentes.
- d) Os materiais híbridos serão estudados quanto a suas características morfológicas, química e de dispersabilidade empregando técnicas integradas de microscopia eletrônica (SEM e TEM, inclusive criogênico), microscopia de varredura por sondas (AFM), espectroscópicas (UV-vis, Raman, XPS e FTIR), espalhamento (DRX e DLS/zeta), entre outros.

Estudos avançados da interação de óxido de grafeno e lignina:

- e) Simulações computacionais empregando ferramentas de dinâmica molecular, e ensaios de adesividade entre ponteiros de AFM modificadas com lignina e flakes de óxido de grafeno poderão ser empregados para detalhar as informações sobre as interações entre os componentes.

## Referências

- [1] Liu, Y. *et al.*; Journal of Membrane Science (2022), 644,120126.
- [2] Zeng, Z., *et al.*; ACS Applied Materials and Interfaces (2018), 10(9), pp. 8205-8213.
- [3] Chen, C., *et al.*; Sensors and Actuators, B: Chemical (2018), 255, pp. 1569-1576.
- [4] Wu, Z., *et al.*; International Journal of Biological Macromolecules (2020), 143, pp. 325-333.