

### MpoMef05-006

#### **Avaliação da influência da modificação superficial da celulose nanocristalina com o ácido 3-tiofenoacético nas propriedades eletrônicas e ópticas do P3HT**

Da Silva, M.C.(1); Silva, A.D.(1); De Menezes, A.J.(2); Filho, F.M.(1); Alves, M.R.A.(1);

(1) UNIFEI; (2) UFSCar - So;

Estudos da literatura mostram que as suspensões de celulosas nanocristalinas (CNC) com concentrações entre 5-10% m/m podem atuar como cristais líquidos com ordenação nemática quiral, preservado esse ordenamento após a secagem do solvente (1). Essa propriedade tem motivado estudos sobre a aplicação de CNC como substratos para a elaboração de filmes de polímeros condutores (PC) visto que a morfologia fibrilar e rígida do nanocristal pode favorecer o ordenamento macromolecular dos PC e otimizar as suas propriedades ópticas e elétricas (2). Porém, o uso de CNC in natura, devido a uma maior interação intermolecular por ligações de hidrogênio entre as nanocargas, promove a separação de fase em compósitos de matrizes olefinicas. Por isso, nesse trabalho, empregou-se o ácido 3-tiofenoacético (A3TA) como agente compatibilizante entre a celulose e o polímero 3-hexiltiofeno (P3HT). Os CNC usados, extraídos de polpa de celulose branqueada de Eucalyptus via hidrólise ácida com rendimento de extração de 55% m/m, apresentaram grau de cristalinidade de 85% e razão aspecto (L/D) de 12. As superfícies desses nanocristais foram esterificadas com o ácido 3-tiofenoacético (A3TA) dando origem a nanocarga denominada NCCA3TA. A reação de esterificação foi comprovada por caracterização estrutural por espectroscopia na região do infravermelho a partir do surgimento da banda de absorção em 1737  $\text{cm}^{-1}$  e da ressonância magnética nuclear através da identificação dos picos centrados em 157 ppm e entre 173 e 174 ppm, atribuídos respectivamente, aos carbonos do grupo éster. Compósitos de NCCA3TA e P3HT foram preparados a partir da mistura física dos seus componentes usando dispersões contendo 10, 20, 30 ou 40% m/m de NCCA3TA em relação a massa do PC. As análises de UV-Vis apontaram para todos os compósitos o deslocamento do máximo de absorção para maiores comprimentos de onda (deslocamento batocrômico), variando de 495 nm (P3HT) para 495 nm em média para os compósitos. Esse resultado, somado aos menores valores de energias de band gap sugerem um aumento da planaridade das macromoléculas do polímero conjugado e aumento do comprimento de conjugação das cadeias do P3HT em função da presença do biopolímero com morfologia fibrilar. Quanto à condutividade elétrica todos os compósitos apresentaram valores superiores ao de condutividade, com destaque para o compósito P3HT-NCCA3TA contendo 30 m/m da nanocarga que apresentou condutividade de 40  $\text{mS/cm}$  à 200V, 130 vezes maior que a obtida para o polímero conjugado (0,31  $\text{mS/cm}$ ).

1- CRISTIANO, R. et al. Síntese de cristais líquidos derivados do nitroazobenzeno: uma proposta de síntese multi-etapas aplicada às aulas de química orgânica experimental. *Química Nova*, 37,181–185, 2014. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422014000100031> 2- HAI, T. A. P.; SUGIMOTO, R. Surface functionalization of cellulose with poly(3-hexylthiophene) via novel oxidative polymerization. *Carbohydrate Polymers*, 179, 221–227, 2018. <http://dx.doi.org/10.1016/j.carbpol.20>