cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

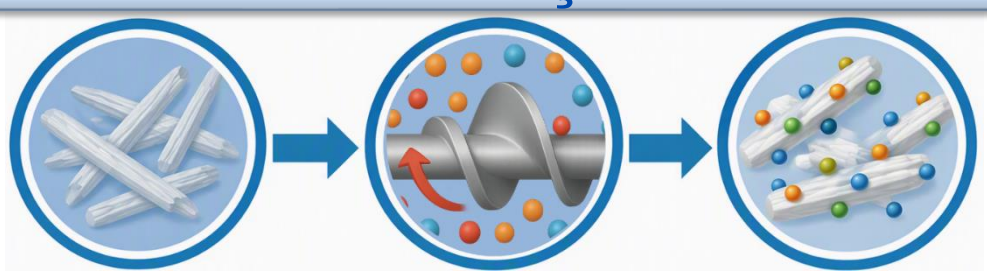
Parâmetros de solubilidade de Hansen como indicadores da funcionalização mecanoquímica da CNC

Guatimosim, T.S.[1]; Dias, F.T.G.[2]; Bianchi, O.[1]

[1] Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGE3M), Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, RS, Brasil.

[2] Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais (PPGCIMAT), Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, RS, Brasil.

Introdução



CELULOSE NANOCRISTALINA
Limitações: cristalinidade e alta hidrofilicidade

MODIFICAÇÃO MECANOQUÍMICA
Energia mecânica, livre de solventes.

REAÇÕES MECANOQUÍMICAS
Esterificação. Fosforilação.

Figura 1. Esquema de modificação mecanoquímica.

Objetivos

Investigar a modificação mecanoquímica da CNC por meio de reações de esterificação e fosforilação conduzidas em misturador termocinético sob altas taxas de cisalhamento (~20900 s^{-1}) e temperaturas inferiores a 100 °C por 60 minutos.

Metodologia

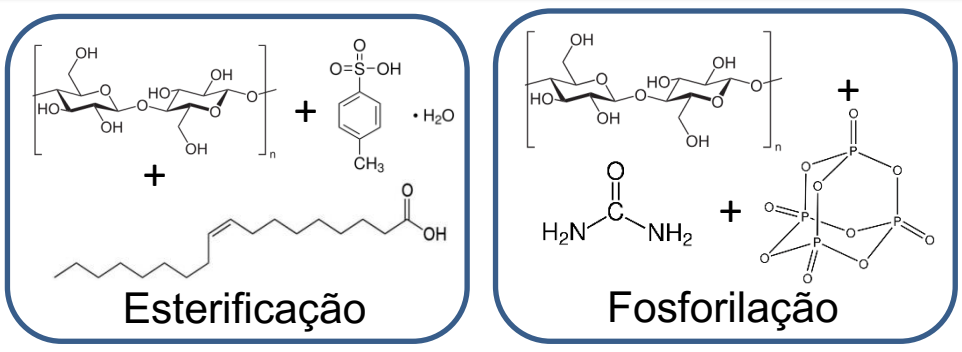


Figura 2. Estruturas químicas dos materiais utilizados.

Reações Mecanoquímicas



Figura 3. Esquema da metodologia utilizada.

Parâmetros de Solubilidade de Hansen (HSP)

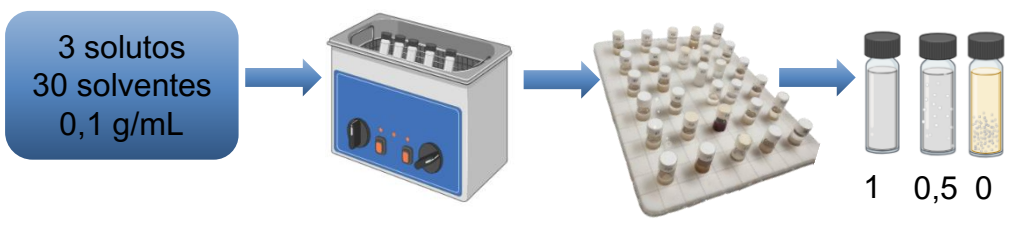
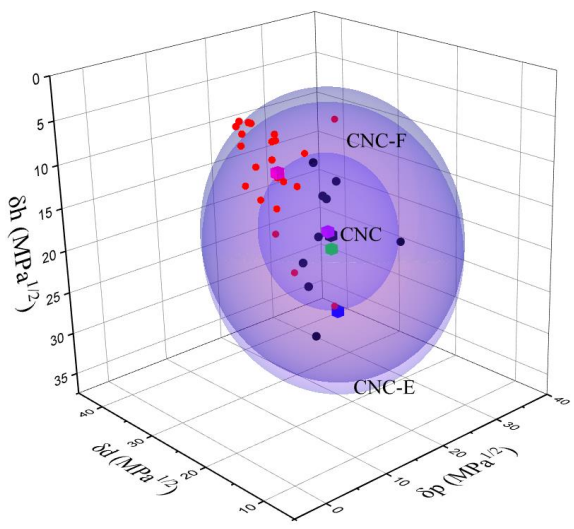


Figura 4. Esquema da metodologia do HSP.

Resultados e Discussão

- Energia de coesão em contribuições dispersivas (δ_d), polares (δ_p) e de ligações de hidrogênio (δ_h);
- Correlação entre alterações químicas superficiais e mudanças nas interações intermoleculares;
- Ajuste da esfera de solubilidade via software Solubility.



- Maus solventes
- Bons solventes
- CNC
- CNC-E
- Ureia
- CNC-F
- Ácido oleico

Figura 5. Esferas de solubilidade.

RED: interpretação probabilística da afinidade soluto-solvente por meio de função logística (Bianchi, 2026).

$$p_i = \frac{1}{1 + \exp[-k(1 - RED_i)]}$$

p_i: probabilidade de solubilidade;
$-k$: parâmetro que controla a inclinação da transição;
RED_i: diferença relativa de energia.

Tabela 1. Parâmetros de Solubilidade de Hansen e classificação dos solventes.

						Classificação		
Amostra	δ_d	δ_p	δ_h	R_o	RED	0	0,5	1
CNC	22,55	19,50	18,09	16,19	0,70	16	11	3
CNC-E	22,21	19,17	19,49	16,04	0,69	23	5	2
CNC-F	18,06	14,45	15,28	8,33	0,19	24	6	0

* As unidades de δ_d, δ_h, δ_p e R_o e são $MPa^{1/2}$. RED é adimensional.

Tabela 2. Interpretação dos resultados.

Amostra	Interpretação
CNC	Caráter polar associado aos grupos hidroxila e sulfato.
CNC-E	Alterações sutis nos HSP, apesar do caráter apolar da cadeia do ácido oleico.
CNC-F	Redução inesperada de δ_p e δ_h: possível dessulfatação. Menor R_o sugere maior seletividade.

Conclusões

- **HSP:** ferramenta promissora para caracterizar modificações químicas e avaliar alterações na hidrofobicidade da CNC.
- **Modificação mecanoquímica:** eficaz na funcionalização superficial da CNC.
- **Aplicações:** maior compatibilidade com matrizes apolares e potencial para materiais sustentáveis de alto desempenho.

Referências e Agradecimentos

BIANCHI, O. A Probabilistic Interpretation of the Relative Energy Difference in Hansen Solubility Theory. Macromolecular Theory and Simulations, v. 35, no. 4 (2026): e70045.

FISS, B. G. *et al.* Mechanochemical Phosphorylation of Polymers and Synthesis of Flame-Retardant Cellulose Nanocrystals. ACS Sustainable Chemistry and Engineering, [*s. l.*], v. 7, n. 8, p. 7951–7959, 2019.

HANSEN, C. M. Hansen solubility parameters: a user's handbook. 2. ed. [*S. l.*: *s. n.*], 2007.

Hadid, M., *et al.*, Phosphorylated cellulose for water purification: a promising material with outstanding adsorption capacity towards methylene blue. Cellulose, 2021. 28(1): p. 7893-7908.

HOU, D. F. *et al.* Efficient Conversion of Cellulose to Thermoplastics by Mechanochemical Esterification. ACS Sustainable Chemistry and Engineering, [*s. l.*], v. 11, n. 20, p. 7655–7663, 2023.

PPGE3M · LaPol · CNPq · MACOPV · FAPERGS