



# XXV Congresso de Iniciação Científica da Unicamp

18 a 20 Outubro Campinas | Brasil

25 anos

2017



## Estudo da hidrofiliçidade das diferentes faces da celulose cristalina

Lucas N. Trentin\*, Munir S. Skaf.

### Resumo

Neste projeto, foram empregadas técnicas de simulação computacional por dinâmica molecular para investigar as propriedades de hidrofiliçidade das diferentes faces da celulose cristalina do ponto de vista molecular. A partir de três simulações independentes de 40 ns, observou-se que as faces (010) e (110) foram totalmente molhadas, enquanto as faces (1-10) e (100) apresentaram ângulos da ordem de 30°, os quais foram associados à estrutura de cada superfície.

### Palavras-chave:

Nanocelulose cristalina, dinâmica molecular, hidrofiliçidade.

### Introdução

A biomassa lignocelulósica proveniente do bagaço da cana-de-açúcar é um material promissor para geração de biocombustíveis renováveis. Entretanto, sua degradação é cara e lenta por conta da estrutura molecular da parede celular das plantas, que é constituída de celulose, hemicelulose e lignina. Logo, entender aspectos moleculares destes componentes é importante para o desenvolver tecnologias para sua degradação. Neste contexto, propõe-se a utilização de simulações de dinâmica molecular para caracterizar a hidrofiliçidade de diferentes faces da celulose em nível molecular a partir do ângulo de contato de uma nanogotícula de água com a superfície de celulose. Tais estudos são relevantes por conta da dificuldade de se obter estas propriedades experimentalmente, e pelo fato da desconstrução química e enzimática da celulose depender altamente das propriedades superficiais.

### Resultados e Discussão

Para o estudo da hidrofiliçidade da superfície de celulose a partir do ângulo de contato da nanogotícula de água, foram utilizadas as faces (010), (110), (1-10) e (100) da celulose cristalina do tipo I $\beta$ .

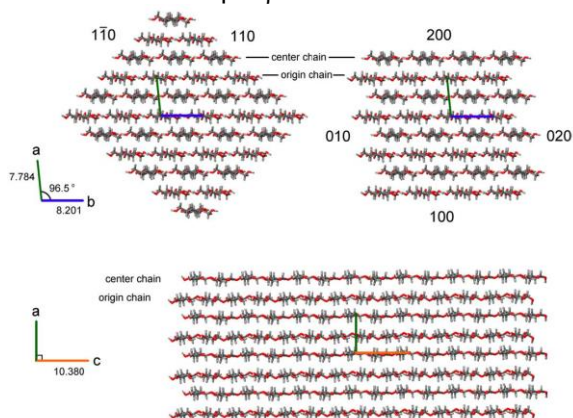


Figura 1. Vista frontal e lateral do cristal de celulose, destacando suas diferentes faces <sup>1</sup>.

O sistema face/gota foi construído utilizando os softwares Cellulose Builder <sup>2</sup> e Packmol <sup>3</sup>. Os sistemas consistiam na face de interesse e uma gota com 3000 moléculas de água. Em seguida, realizaram-se etapas de minimização e três simulações de dinâmica independentes de 40ns para cada sistema utilizando o campo de força CHARMM.

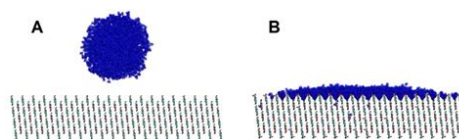


Figura 2. Evolução do sistema (010) da situação inicial (A) até atingir a condição de equilíbrio (D).

Após o equilíbrio ser atingido, os ângulos de contato foram obtidos a partir da análise das imagens com a ferramenta LBADSA<sup>4</sup>, baseada no ajuste da equação de Young-Laplace ao perfil da gota.

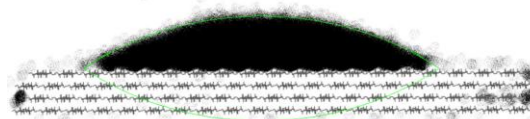


Figura 3. Ajuste da curva gerada ao perfil da gota.

Os ângulos de contato obtidos estão apresentados na Tabela 1 em um intervalo de confiança de 99%.

Tabela 1. Ângulos de contato obtidos para cada face.

Face	(010)	(110)	(100)	(1-10)
Ângulo	0	0	33,0 ± 0,8	28 ± 3

Assim, superfícies com exposição de grupos -OH mais efetiva foram totalmente molhadas, enquanto aquelas com -CH mais expostos tiveram ângulos de cerca de 30°.

### Conclusões

As simulações realizadas permitiram a caracterização do grau de hidrofiliçidade das superfícies da celulose cristalina, sendo os ângulos obtidos reproduzíveis.

### Agradecimentos

Agradecimentos ao CNPq pela bolsa concedida, ao Instituto de Química da Unicamp e ao Cepid CCES (Fapesp 2013/08293-7) pela estrutura disponibilizada.

<sup>1</sup> Matthews, J. F.; Skopec, C. E.; Mason, P. E.; Zuccato, P.; Torget, R. W.; Sugiyama, J.; Himmel, M. E. e Brady, J. W. *Carbohydr. Res.* **2006**, 341, 138-152.

<sup>2</sup> Gomes, T. C. e Skaf, M. S. *J. Comput. Chem.* **2012**, 33(14), 1338-1346.

<sup>3</sup> Martínez, L.; Andrade, R.; Birgin, E. G. e Martínez, J. M. *J. Comput. Chem.* **2009**, 30(13), 2157-2164.

<sup>4</sup> Stalder, A. F.; Melchior, T.; Müller, M.; Sage, D.; Blu, T. e Unser, M. *Colloids Surf., A.* **2010**, 286(1-3), 92-103.