

PROPOSTA DE TRABALHO – INTERAÇÃO PUCRS/UFSC

Síntese de dispersões aquosas de poliuretano

Os reagentes de partida que se tem trabalhado são os seguintes;

Diisocianatos: hexametileno diisocianato (HDI), isoforona diisocianato (IPDI). Poderemos trabalhar com outros diisocianatos

Polióis: poliésteres dióis, poliéteres dióis (massa molar variada entre 500-3000), policaprolactona diol (MM 1000, 2000)

Emulsificante interno: ácido dimetilol propiônico (DMPA)

A reação ocorre em duas etapas:

1ª etapa- síntese do pré-polímero com terminação-NCO

O polioliol + DMPA+catalisador (DBTDL) é colocado em uma solução com acetona ou metil-etilcetona e o diisocianato é adicionado lentamente sob agitação, atmosfera inerte e controle de temperatura. A razão molar NCO/OH pode ser variada entre 1,1-2,0. O teor residual de NCO livre é medido através da técnica de titulação com dibutilamina até valor constante. Em seguida, os grupos COOH do DMPA são neutralizados com uma amina (ex. Et3N) ou outra base. Pode-se prosseguir com a extensão de cadeia utilizando pequenas moléculas como dióis ou diaminas (ex. butanodiol e hidrazina).

2ª etapa – dispersão da solução polimérica

A solução de PU ionomérico pode ser dispersa em água (método do pré-polímero) ou água dispersa na solução do polímero (método da acetona). Em ambos os casos, procura-se ter dispersões aquosas finais com teor de sólidos na ordem de 50%, mas podemos ter dispersões com valores menores facilmente, com valores maiores é um pouco mais difícil.

Características das dispersões de PU:

- tamanho de partículas médio entre 100 -300 nm
- baixa viscosidade
- micelas formadas pelas cadeias de PU onde a parte interna tende a ser hidrofóbica e a parte externa tende a ter os grupos iônicos (COO-EtN+)

Propostas:

- 1) Tentar “prender” alguma molécula com características hidrofóbicas nas micelas que são formadas na etapa da dispersão; Se já tivermos um fármaco a encapsular, ótimo. Senão podemos tentar encapsular um óleo. Neste caso, podemos adicionar o óleo após a 1ª etapa e obteríamos as partículas/cápsulas seguindo o procedimento da 2ª etapa.

Como o óleo deve ser mais hidrofóbico que o polímero, a expectativa é que ele fique no interior da partícula, enquanto o polímero com seus grupamentos hidrofílicos irá compor a casca. Neste caso estudaríamos a relação óleo/pré-polímero e ainda teríamos como opção estudar a relação ótima do DMPA em função da concentração de óleo (eventualmente pode-ser necessário a adição de outro tensoativo). Neste caso faríamos um estudo comparando nanocapsulas e nanopartículas utilizando um procedimento que ainda não vimos publicado (temos que fazer uma busca melhor).

- 2) Usar processos tradicionais de preparação de nanocapsulas ou nanopartículas a partir do polímero PU inomérico (sem passar pela dispersão tradicional). A segunda parte do trabalho seria utilização do método da miniemulsão em que juntamos a 1ª e a 2ª etapas do procedimento anterior em uma única etapa. Para nanopartículas não deve haver problemas, apesar de termos que minimizar a reação com a água (é possível). Para obter nanocapsulas teremos que privilegiar a polimerização interfacial, o que modifica as condições de operação da reação. OBS: neste caso podemos utilizar o pré-polímero da etapa 1 como tensoativo da miniemulsão.
- 3) A Fernanda (mestranda/PUCRS) pode fazer toda a 1ª parte na PUC e a 2ª parte aqui na UFSC. Bem, acho que vai ficar um trabalho muito interessante, pois iremos comparar a obtenção de nanopartículas e nanocapsulas com 2 estratégias de reação diferentes.