



O Papel Inovador da Polianilina em Tecnologias de Mitigação e Adaptação às Mudanças Climáticas

Jamilton S.Boaes¹ (PG), Edgar A. Sanches¹(PQ), Adriano da Silva Carolino(PQ)¹, Célio M.A. Macalia(PG)^{1,2}
jamilton.boaes@ufam.edu.br

1Universidade Federal do Amazonas, Programa de Pós-Graduação em Física, Av, Rodrigo Otávio Jordão Ramos 1200, Coroado 1, 69067-005, Manaus AM, Brasil.

2- Center for Studies in Science and Technology (NECET), Department of Science, Engineering, Technology, and Mathematics, Higher Institute of Rural Development and Biociences (ISDRB), Rovuma University, Lichinga, Niassa, Mozambique.

Palavras-Chave: PANi, polímero condutor, condutividade, modelagem molecular e novos materiais energéticos.

Introdução

A Polianilina (PANi) é um material promissor, alvo de intenso estudo devido à sua relevância para o desenvolvimento de novas tecnologias com impacto direto na mitigação e adaptação às mudanças climáticas. Suas propriedades, como síntese simplificada, baixo custo, leveza, condutividade ajustável e estabilidade ambiental, a posicionam como uma solução ideal para a transição energética. A PANi tem potencial em diversas aplicações críticas, incluindo o desenvolvimento de baterias leves e microeletrônica para o armazenamento eficiente de energia renovável (eólica e solar), além de sensores eletroquímicos de alta precisão para o monitoramento de poluentes e gases de efeito estufa. Para otimizar o desempenho da PANi, a pesquisa utiliza a síntese química (com HCl como dopante) e o processo de sonicação, seguido de caracterizações. As análises com a integração da modelagem molecular nesse processo permite simular e verificar a estrutura, as interações eletrônicas e o comportamento da PANi em nível atômico verificando as hipóteses e as análise dos resultados, acelerando a descoberta de novas arquiteturas de polímeros otimizados para maior condutividade, estabilidade ou seletividade, acelerando a criação de materiais de próxima geração para um futuro energético mais limpo e sustentável.

Material e Métodos

A Polianilina (PANI) foi sintetizada por meio da polimerização oxidativa da anilina. O processo envolveu a dissolução da anilina (monômero) em ácido clorídrico (HCL) e a preparação de uma solução de persulfato de amônio (APS), que atuou como agente oxidante. A reação ocorreu pela adição lenta do (APS) à solução de anilina, sob agitação e à temperatura ambiente. Após 3 horas, o produto formado, um precipitado verde escuro de Polianilina, foi isolado por filtração a vácuo e purificado com acetona. Na segunda fase as amostras sintetizadas foram submetidas ao ultrassom, variando a potência, controlando tempo e temperatura.

As amostras foram analisadas por FTIR-ATR (Espectroscopia de Infravermelho com Transformada de Fourier por Reflexão Total Atenuada) usando um espectrofotômetro FTIR – Cary 360 equipado com módulo de amostragem ZnSe-ATR com range espectral de 5100 a 600 cm^{-1} , juntamente com propriedades elétricas, medidas por espectroscopia de impedância em temperatura ambiente, empregando um analisador de impedância Solartron 1260. A faixa de

frequência utilizada abrangeu de 10 Hz a 1 MHz, com um potencial aplicado de 500 mV.

Os cálculos de estrutura eletrônica foram realizados utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), com o funcional híbrido B3LYP (Becke, 3-parameter, Lee–Yang–Parr) (Becke 1993) e o conjunto de base 6-311G(d,p), apropriado para sistemas poliméricos com estrutura conjugada.

Resultados e Discussão

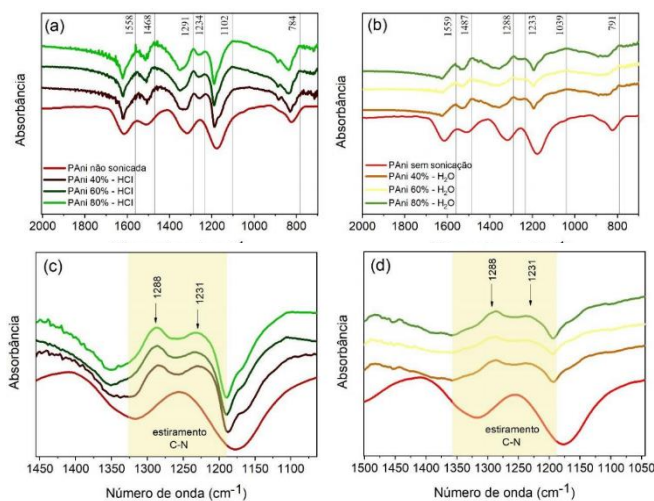


Figura 1. FTIR das amostras de PANis sonicadas em diferentes percentuais de potencial de sonicação (a) em meio ácido e (b) em meio não ácido. Figuras 1(c) e 1(d) apresentam os espectros FTIR ampliados na região entre 1450 e 1100 cm^{-1} para as amostras de PANi sonicadas.

A banda em 1558 cm^{-1} , atribuída ao estiramento C=N dos anéis quinoides, sugere a preservação de segmentos parcialmente oxidados, indicando a estabilidade de unidades estruturais da cadeia mesmo após o processo de sonicação (Cardoso, Lima, e Lenz 2007). Já a banda em 1468 cm^{-1} , relacionada ao estiramento C=C nos anéis benzenoides, aponta para a coexistência de domínios aromáticos, característica da natureza semicristalina da PANi (Tomšik et al. 2023). A presença simultânea dessas duas bandas reforça a configuração estrutural heterogênea da amostra, composta por domínios com diferentes graus de oxidação.

As bandas localizadas em 1180, 1221 e 1314 cm^{-1} são de particular interesse, pois estão associadas às vibrações de estiramento das ligações C–N em anéis aromáticos. O aumento de intensidade nessas bandas pode estar relacionado à formação de crosslinks entre as cadeias poliméricas, fenômeno favorecido pela ação mecânica da sonicação em meio ácido (Banjar et al. 2023). Essa reorganização conformacional contribui para um empacotamento mais eficiente das cadeias, promovendo maior coesão estrutural e estabilidade físico-química. Adicionalmente, os picos observados em 883 cm^{-1} e 832 cm^{-1} , atribuídos à estrutura do anel quinóide 1,4-dissubstituído, indicam uma organização regular dos segments' quinóides, sugerindo que a sonicação não comprometeu a integridade dessas unidades estruturais (Tomšik et al. 2023).

No entanto, as amostras tratadas em meio ácido fig1(a) e (c) exibem bandas mais intensas e bem definidas, especialmente na região entre 1180 e 1314 cm^{-1} , o que sugere maior organização molecular e possível formação de crosslinks entre as cadeias. Em contraste, as amostras sonicadas em água, fig.1(b) e (d) apresentam bandas menos intensas e alargadas, o que pode estar associado à maior desordem estrutural ou à fragmentação parcial das cadeias poliméricas. Essas diferenças nas intensidades das bandas não apenas evidenciam o efeito do meio de sonicação sobre a estrutura da PANi, mas também indicam impactos diretos em suas propriedades físico-químicas, como estabilidade, empacotamento da cadeia e potencial condutivo.

ANÁLISE DA CONDUTIVIDADE

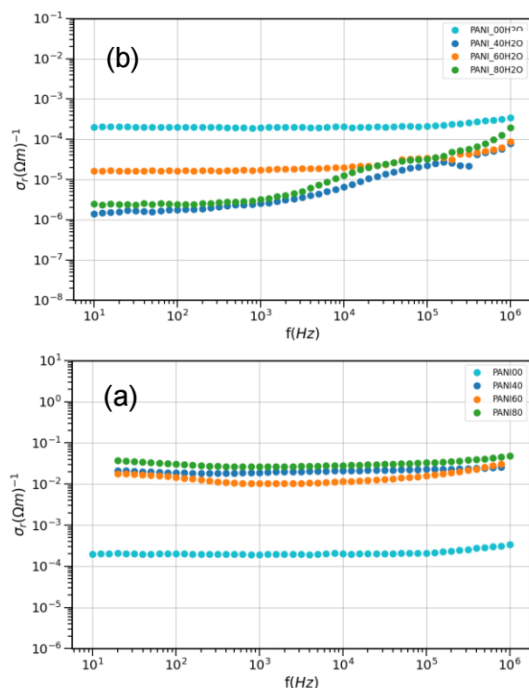


Figura 2. Representação gráfica a condução do sistema Pani sonicada (a) em meio ácido (b) na água.

A Figura 2 (a), referente às amostras tratadas em meio ácido, revela que a condutividade elétrica das amostras PANi 40% (pontos azuis) e PANi 80% (pontos verdes) é ligeiramente superior à da PANi 60% (pontos laranja) ao longo do espectro de frequência. Essa diferença de desempenho pode estar associada à conformação estrutural mais favorável dessas amostras, relacionada ao maior grau de reticulação entre cadeias poliméricas — ou crosslink — promovido pela sonicação em condições mais intensas ou menos severas. A presença de um sistema mais reticulado tende a conferir maior

conectividade entre domínios condutores, facilitando o transporte de carga e resultando em condutividade elétrica aprimorada. Já a Figura 2 (b) mostra que as amostras sonicadas em meio água apresentam condutividades significativamente mais baixas (10^{-6} a 10^{-4} $(\Omega\cdot\text{m})^{-1}$), e um aumento mais acentuado somente em altas frequências, indicando que, embora a sonicação em água possa induzir algum grau de reorganização estrutural, a ausência de dopantes efetivos prejudica a formação de uma rede condutora robusta e bem reticulada (Ghazali e Samsudin 2025).

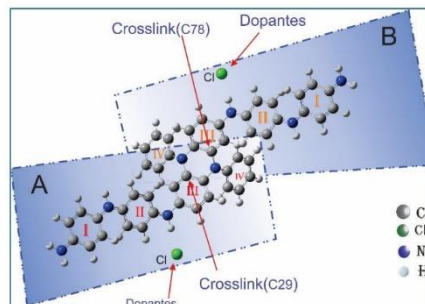


Figura 3. Representa a estrutura otimizada das cadeias poliméricas com crosslink.

Com o objetivo de investigar teoricamente a formação de crosslinks em PANi, foram construídos modelos moleculares.

Conclusões

A análise integrada dos resultados experimentais e teóricos permitiu concluir que a combinação de sonicação controlada em meio ácido favorece a formação de crosslinks, melhora a cristalinidade, estabiliza a estrutura e potencializa a condutividade da PANi. A sonicação promove, por meio da cavitação, a quebra de ligações covalentes e a subsequente formação de ligações intercadeias. Esse fenômeno, corroborado por simulações baseadas em dinâmica browniana, evidencia como forças de cisalhamento induzidas por ultrassom podem modificar profundamente a estrutura polimérica. Em suma, este trabalho propõe uma abordagem inovadora para aumentar a condutividade em polímeros condutores, abrindo novas perspectivas para o desenvolvimento de materiais com propriedades aprimoradas, impactando novas tecnologias energéticas limpas.

Agradecimentos

CNPQ pelo suporte financeiro e o DQ-ICE-UFAM, por apoiar o LTMB.

Referências

- [1] Cardoso, Mara Joelma Raupp, Martha Fogliato Santos Lima, e Denise Maria Lenz. 2007. "Polyaniline synthesized with functionalized sulfonic acids for blends manufacture". *Materials Research* 10(4):425–29. doi: 10.1590/S1516-14392007000400017.
- [2] Tomšik, Elena, Daniil R. Nosov, Iryna Ivanko, Václav Pokorný, Magdalena Konefał, Zulfija Černochová, Krzysztof Tadyszak, Daniel F. Schmidt, e Alexander S. Shaplov. 2023. "A New Method to Prepare Stable Polyaniline Dispersions for Highly Loaded Cathodes of All-Polymer Li-Ion Batteries". *Polymers* 15(11). doi: 10.3390/polym15112508.
- [3] Banjar, Mohd Faizar, Fatin Najwa Joynal Abedin, Ahmad Noor Syimir Fizar, Norazilawati Muhamad Sarih, Md Sohrab Hossain, Hakimah Osman, Nor Afifah Khalil, Ahmad Naim Ahmad Yahaya, e Muzafar Zulkifli. 2023. "Synthesis and Characterization of a Novel Nanosized Polyaniline". *Polymers* 15(23). doi: 10.3390/polym15234565.
- [4] Ghazali, N. M., e A. S. Samsudin. 2025. "Correlated barrier hopping and ionic conduction mechanism in glycolic acid-doped Alginate-PVA biopolymer electrolytes". *Current Applied Physics* 71:48–56. doi: 10.1016/j.cap.2024.12.005.