

## Stabilità della cellulosa nel cluster di acqua- approfondimento della teoria del funzionale della densità e della spettroscopia infrarossa

Veerapandian Ponnuchamy<sup>1\*</sup>, Anna Sandak<sup>1,2</sup>, Jakub Sandak<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> InnoRenew CoE, Livade 6, 6310 Izola, Slovenia, veerapandian.ponnuchamy@innorenew.eu, anna.sandak@innorenew.eu, jakub.sandak@innorenew.eu

<sup>2</sup> University of Primorska, Faculty of Mathematics, Natural Sciences and Information Technologies, Glagoljaška 8, 6000 Koper, Slovenia, anna.sandak@famnit.upr.si

<sup>3</sup> University of Primorska, Andrej Marušič Institute, jakub.sandak@upr.si

\*Autore corrispondente

La cellulosa è uno dei principali costituenti del legno e conferisce un'eccellente resistenza e rigidità alle pareti cellulari delle piante. La cellulosa esiste in fase cristallina, semicristallina o amorfa ed è costituita da polimeri di glucosio disposti in modo lineare che sono fortemente legati attraverso legami a idrogeno e formano fibrille altamente cristalline. Il legno ha una forte tendenza ad assorbire o rilasciare acqua a causa delle variazioni di umidità relativa dell'aria circostante. Questo processo di assorbimento subisce apparentemente un processo di rigonfiamento che influenza fortemente le risultanti proprietà meccaniche, fisiche e chimiche del legno. In particolare, l'interfase cellulosa-emicellulosa è una delle regioni predominanti responsabili del rigonfiamento del legno (Kulasinski et., 2015). La conoscenza della quantità di umidità assunta dalla cellulosa è essenziale per conoscere l'aumento percentuale di peso (WPG) del legno e l'entità dell'alterazione delle sue proprietà fisiche. Per poter conoscere esattamente l'aumento percentuale di peso (WPG), è necessario calcolare il numero di molecole d'acqua necessarie per stabilizzare la catena della cellulosa.

Il presente lavoro utilizza il metodo della teoria del funzionale della densità (DFT) per studiare l'interazione cellulosa-acqua a livello atomico. Questo metodo evidenzia il numero di molecole d'acqua che possono interagire con la cellulosa, la forza del legame a idrogeno e l'interazione cellulosa-acqua nello spettro NIR. Una singola unità di cellobiosio (dimero di glucosio) è qui considerata sufficiente a rappresentare il modello della cellulosa, garantendo comunque tempi e costi di calcolo ragionevoli. I calcoli DFT sono eseguiti a livello di teoria wB97X-D/6-311g(d,p) corretta per la dispersione che si è dimostrata coerente per l'interazione intermolecolare e la riproduzione dei legami a idrogeno. Le caratteristiche del legame a idrogeno e le frequenze fondamentali dell'infrarosso vengono valutate e confrontate con gli esperimenti per fornire una chiara descrizione delle variazioni delle frequenze dello stretching O-H. Questo studio dimostra che gli spettri IR (e di conseguenza NIR) contengono vibrazioni cellulosa-acqua nelle bande di combinazione e nelle regioni degli overtones e propone anche la quantità di molecole d'acqua assorbite dalla cellulosa per conoscere WPG o il contenuto di umidità nel legno.

**Parole chiave:** cellulosa, umidità, teoria del funzionale della densità, vicino infrarosso (NIR), legame a idrogeno

**Ringraziamenti:** Gli autori ringraziano la Commissione Europea per il finanziamento del progetto InnoRenew (grant agreement #739574) sotto il programma Horizon2020 Widespread-Teaming e la Repubblica di Slovenia (finanziamento investimento della repubblica di Slovenia)

e del Fondo dell'Unione Europea per lo sviluppo regionale (European Union Regional Development Fund).

## RIFERIMENTI

Kulasinski, K., Guyer, R., Keten, S., Derome, D., Carmeliet, J., 2015. Impact of moisture adsorption on structure and physical properties of amorphous biopolymers. *Macromolecules*, 48(8), 2793-2800. <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.macromol.5b00248>