|  |
| --- |
| **M**edellín **A**ir q**U**ality **I**nitiative (MAUI) |
| Programa:Modelos de exposición humana a la contaminación atmosférica en áreas urbanas como herramienta de toma de decisiones (*Exposure to Pollutants Regional Research*)ExPoR2 |
| Enero 2020 - Diciembre 2022 |
|

|  |  |
| --- | --- |
|  | Grupo de Investigación en Modelado Matemático |
| Grupo de Investigación en Biodiversidad, Evolución y Conservación (BEC) |
| Grupo de Investigación en Geología Ambiental e Ingeniería Sísmica |
| Grupo de Investigación en Ingeniería de Diseño (GRID) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | Grupo de Ingeniería y Gestión Ambiental GIGA |
| Genética, Regeneración y Cáncer |

|  |  |
| --- | --- |
| Logo Universidad CES | Grupo de Investigación Biología CES |
| Grupo de Investigación en Ciencias Farmacéuticas ICIF-CES |

|  |  |
| --- | --- |
| Universidad del Norte | Redes de Computadores e Ingeniería de Software-GreCIS |

 |
| Proyecto:1. Perfiles químicos y morfológicos del material nano y microparticulado. |
| **Filtros de nanofibras poliméricos**ExPoR2-RP001 |

**CONTROL DOCUMENTAL**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | **Acción** | **Nombre** | **Entidad** | **Fecha****(DD/MM/AAAA)** |
|  | Creación | Laura Margarita Valencia | U. EAFIT | 2020-03-25 |
|  | Aprobación | Monica Lucia Alvarez Lainez | U. EAFIT | 31/03/2020 |
|  | Distribución | Olga Lucia Quintero Montoya | U. EAFIT | 15/04/2020 |
|  | Elija un elemento. |  | Elija un elemento. | Fecha |
|  | Elija un elemento. |  | Elija un elemento. | Fecha |
|  | Elija un elemento. |  | Elija un elemento. | Fecha |
|  | Elija un elemento. |  | Elija un elemento. | Fecha |

**CONTENIDOS**

[**CONTENIDOS** 3](#_Toc35877473)

[Introducción 4](#_Toc35877474)

[Métodos 4](#_Toc35877475)

[1.1 Selección de polímeros para fabricación 4](#_Toc35877476)

[1.1.1 Momento dipolar 4](#_Toc35877477)

[1.1.2 Solubilidad en agua 5](#_Toc35877478)

[1.1.3 Ángulo de contacto respecto al agua (en inglés WCA) 5](#_Toc35877479)

[1.2 Selección de parámetros para el proceso de fabricación 6](#_Toc35877480)

[1.2.1 Concentración de la solución 6](#_Toc35877481)

[1.2.2 Velocidad de alimentación de la solución 6](#_Toc35877482)

[1.2.3 Campo eléctrico 7](#_Toc35877483)

[1.2.4 Distancia punta de aguja a colector 7](#_Toc35877484)

[Referencias 8](#_Toc35877485)

# Introducción

Se pretende fabricar filtros de nanofibras poliméricos para capturar el material particulado de menor tamaño (fino y ultrafino), Esto basado en la hipótesis de lograr una química superficial de las fibras que se acople con la que presenta el material particulado, de tal forma que se incremente la capacidad de captura de tipos y tamaños de material particulado específicos. Esta química superficial depende de varios factores como el tipo de polímero y sus características intrínsecas, y de otras características extrínsecas como la combinación del polímero con otros materiales o procesos, para funcionalización superficial de las fibras, así como de los parámetros usados en la fabricación de las fibras.

De acuerdo con lo anterior, la primera parte de la investigación se basa en la selección de los polímeros de trabajo y sus condiciones de fabricación.

# Métodos

## Selección de polímeros para fabricación

Se pretende fabricar filtros de nanofibras con tres polímeros diferentes (esto implica energías superficiales diferentes): Poliacrilonitrilo (PAN), Fluoruro de polivinilideno (PVDF) y Politetrafluoroetileno (PTFE), para comparar su desempeño en el proceso de captura de material particulado. La selección de los polímeros se hizo teniendo en cuenta los siguientes parámetros:

## Momento dipolar

Indica la medida de la intensidad de la fuerza de atracción entre dos átomos. Algunos autores han reportado que los polímeros con mayor momento dipolar tienen mejores eficiencias de captura de material particulado. Esto puede atribuirse a que los grupos funcionales polares como C–O, C=O y C–N presentes en la superficie externa del material particulado, se unen a la superficie del polímero mediante fuerzas intermoleculares dipolo-dipolo y dipolo inducido. Entre mayor sea el momento dipolar, son más fuertes las interacciones y por lo tanto la eficiencia de captura es más alto [1]. El momento dipolar puede cambiar con la habilidad de polarización del polímero y otros factores [2]. La selección se hizo inicialmente de acuerdo con el momento dipolar del monómero asociado al polímero, de diferentes polímeros consultados PAN tiene el mayor (3,6 Db) [1], [3] y PTFE el menor siendo (0 Db).

## Solubilidad en agua

Para asegurarse de seleccionar polímeros no solubles en agua, con el fin de evitar que se degraden durante su exposición a la humedad del ambiente. Se calcularon los parámetros de solubilidad de Hansen para cada polímero con respecto al agua como solvente. En este caso la miscibilidad se determina calculando la diferencia de energía relativa (en inglés: RED), donde si RED<1 hay miscibilidad, si RED>1 no hay miscibilidad, para todos los polímeros elegidos RED es mayor que 1 [4].

## Ángulo de contacto respecto al agua (en inglés WCA)

Indica qué tan mojable o no es un sólido, se refiere al ángulo que forma la superficie de un líquido al entrar en contacto con un sólido. El valor del ángulo de contacto depende principalmente de la relación que existe entre las fuerzas adhesivas entre el líquido y el sólido y las fuerzas cohesivas del líquido. Un polímero con un WCA alto puede tener mayor estabilidad en el proceso de captura independientemente de la cantidad de humedad presente en el ambiente [5]; así como mayor capacidad de reusabilidad, ya que las gotas de agua podrían arrastrar el material particulado captado logrando la limpieza del filtro [6] .Este valor se presenta en un intervalo, ya que depende la morfología de las nanofibras (como rugosidad, presencia de “beads”, funcionalización, incluso tamaño de las fibras) [7]. De acuerdo con esto se seleccionaron polímeros con WCA altos, sin dejar de lado el PAN que es altamente promisorio en términos de polaridad, lo que también permite hacer un contraste en la energía superficial de los polímeros seleccionados.

En la tabla 1 se muestran los parámetros para cada polímero, PAN se eligió por su alto momento dipolar y fácil hilabilidad, PVDF porque también tiene un momento dipolar significativo en comparación con otros polímeros y es fácilmente polarizable, además de su alto ángulo de contacto. PTFE se eligió para comparar el efecto de la polaridad de los otros polímeros y con el fin de conocer su influencia en la energía superficial dado su alto WCA.

***Tabla 1*** *Parámetros para selección de polímeros*

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **POLÍMERO** | **Momento dipolar (Db)** | **RED (respecto a H2O)** | **WCA** |
| PAN | 3,6 [1] | 3,26\* | (11° – 99,5°) [8]–[10]  |
| PVDF | 2,1 [1] | 3,39\* | (130° – 150°) [5], [9], [11] |
| PTFE | 0,0 | 10,62\* | (130°– 140°) [12], [13] |

\*Calculados a partir de los parámetros de Hansen reportados en [4], [14], [15]

## Selección de parámetros para el proceso de fabricación

La mejor técnica para fabricar filtros de nanofibras es el electrohilado o “electrospinning”, ya que pueden obtenerse fibras entre 100 y 500 nm de diámetro con área superficial específica, porosidad y capacidad de adsorción altas [16], lo que les permite capturar efectivamente material particulado fino y ultrafino (tamaños que actualmente son el mayor desafío de los filtros comerciales).

Existen tres componentes principales del proceso de electrohilado: una fuente de alto voltaje, un tubo capilar con pipeta o aguja de diámetro pequeño y una pantalla colectora metálica. En este proceso, el alto voltaje se emplea para crear un chorro cargado eléctricamente de solución polimérica o de un solo polímero fundido contenido en el capilar. Este chorro sale de la aguja del capilar (jeringa para fines prácticos) y antes de alcanzar la pantalla colectora, el solvente de la solución se evapora y se llega al estado sólido (dependiendo del estado del polímero en la jeringa). Este chorro se estira por efecto del campo eléctrico aplicado, formándose una fibra que es recogida sobre un colector como una red de pequeñas fibras interconectadas [17], [18].

Una manipulación apropiada de cada uno de los parámetros afecta significativamente la morfología y el diámetro de las nanofibras obtenidas, determinando así el éxito del proceso [16]. Para este caso los parámetros de fabricación a controlar son cuatro:

## Concentración de la solución

De este parámetro depende que se formen fibras o no, permite ajustar el diámetro de fibra deseado, cambia de acuerdo con la naturaleza del polímero que se esté utilizando y sus características como el peso molecular, entre otras [18], [19].

.

## Velocidad de alimentación de la solución

Si la velocidad es muy alta, el chorro no puede estirarse por completo, obteniendo mayor tamaño de fibra, si es muy baja no habrá una alimentación constante para obtener un hilado uniforme, también puede influir en la porosidad. Cambia con la naturaleza del polímero y otros parámetros como la viscosidad de la solución, entre otros [18], [19].

## Campo eléctrico

El voltaje aplicado debe ser suficiente para lograr una alimentación constante y uniforme de la fibra al colector, si este se incrementa puede disminuir el diámetro de fibra y se obtienen fibras más lisas. Cambia con la naturaleza del polímero y otros parámetros como la tensión superficial de la solución, entre otros [18], [19].

## Distancia punta de aguja a colector

Una distancia corta genera un campo eléctrico más alto, el diámetro de fibra disminuye, se requiere encontrar una distancia mínima a la que las fibras se alcancen a secar antes de alcanzar el colector [18], [19].

Hay otros parámetros de la solución como el peso molecular, la conductividad y la volatilidad del solvente [18], [19].. En este caso se utilizará el solvente que mejor disuelva el polímero y solo se cambiará la concentración de la solución. Así mismo los parámetros ambientales como la temperatura y la humedad se mantendrán invariables durante el proceso de electrospinning. Los parámetros a usar en este caso se muestran en la tabla 2,

***Tabla 2*** *Parámetros para el proceso de fabricación*

|  |  |
| --- | --- |
| **Parámetro** |  |
| Concentración de la solución (% en peso) | 10 - 20  |
| Velocidad de alimentación de la solución (ml/h) | 0,1 - 1 |
| Campo eléctrico (kV) | 7 - 15 |
| Distancia punta de aguja a colector (cm) | 7 - 12 |

# Referencias

[1] C. Liu, P. Hsu, H. Lee, M. Ye, G. Zheng, N. Liu, W. Li, and Y. Cui, “capture,” *Nat. Commun.*, vol. 6, pp. 1–9, 2015.

[2] H. Liu, S. Zhang, L. Liu, J. Yu, and B. Ding, “A Fluffy Dual-Network Structured Nanofiber / Net Filter Enables High-Efficiency Air Filtration,” vol. 1904108, pp. 1–10, 2019.

[3] J. Li, D. Zhang, T. Yang, S. Yang, X. Yang, and H. Zhu, “Nano fi brous membrane of graphene oxide-in-polyacrylonitrile composite with low fi ltration resistance for the e ff ective capture of PM 2 . 5,” *J. Memb. Sci.*, vol. 551, no. December 2017, pp. 85–92, 2018.

[4] A. F. M. Barton, *CRC HANDBOOK of SOLUBILITY PARAMETERS and OTHER COHESION PARAMETERS*. 1991.

[5] H. Liu, S. Zhang, L. Liu, J. Yu, and B. Ding, “High-Performance PM 0 . 3 Air Filters Using Self-Polarized Electret Nanofiber / Nets,” vol. 1909554, pp. 1–8, 2020.

[6] X. Li, N. Wang, G. Fan, J. Yu, J. Gao, G. Sun, and B. Ding, “Journal of Colloid and Interface Science Electreted polyetherimide – silica fibrous membranes for enhanced filtration of fine particles,” *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 439, pp. 12–20, 2015.

[7] A. Rajak, D. Ahmad, F. Iskandar, M. Miftahul, and K. Khairurrijal, “Electrospun nanofiber from various source of expanded polystyrene ( EPS ) waste and their characterization as potential air filter media,” *Waste Manag.*, vol. 103, pp. 76–86, 2020.

[8] R. Padhye and I. L. Kyratzis, “Electrospun Polyacrylonitrile/β-Cyclodextrin Composite Membranes for Simultaneous Air Filtration and Adsorption of Volatile Organic Compounds,” *ACS Appl. Nano Mater.*, vol. 1, pp. 4268–4277, 2018.

[9] H. Kim, S. J. Park, D. Kim, S. Lee, O. S. Kwon, and I. K. Kim, “Moisture Effect on Particulate Matter Filtration Performance using Electro-Spun Nanofibers including Density Functional Theory Analysis,” no. April, pp. 1–8, 2019.

[10] Z. Khan, F. Kafiah, H. Z. Shafi, F. Nufaiei, S. A. Furquan, and A. Matin, “Morphology , Mechanical Properties and Surface Characteristics of Electrospun Polyacrylonitrile ( PAN ) Nanofiber Mats,” no. February, 2015.

[11] F. Zuo, S. Zhang, H. Liu, H. Fong, X. Yin, J. Yu, and B. Ding, “Free-Standing Polyurethane Nanofiber / Nets Air Filters,” vol. 1702139, pp. 1–11, 2017.

[12] H. Xu, W. Jin, F. Wang, G. Liu, C. Li, and J. Wang, “Formation and characterization of polytetra fl uoroethylene nano fi ber membranes for high-e ffi ciency fi ne particulate fi ltration,” pp. 13631–13645, 2019.

[13] H. Efficiency and P. M. Filter, “Waterproof-breathable PTFE nano- and Microfiber Membrane as High Efficiency PM2.5 Filter,” pp. 1–14.

[14] B. Wang and B. Shi, “Comparison of Surface Tension Components and Hansen Solubility Parameters Theories . Part I : Explanation of Protein Adsorption on Polymers Comparison of Surface Tension Components and Hansen Solubility Parameters Theories . Part I : Explanation of Protein Adsorption on Polymers,” vol. 2348, 2010.

[15] C. A. Mertdogan, H. Byun, M. A. Mchugh, and W. H. Tuminello, “Solubility of Poly ( tetrafluoroethylene- co -19 mol % hexafluoropropylene ) in Supercritical CO 2 and Halogenated Supercritical Solvents,” vol. 9297, no. 96, pp. 6548–6555, 1996.

[16] N. Bhardwaj and S. C. Kundu, “Electrospinning : A fascinating fi ber fabrication technique,” vol. 28, pp. 325–347, 2010.

[17] J. M. Deitzel, J. Kleinmeyer, D. Harris, and N. C. B. Tan, “The effect of processing variables on the morphology of electrospun nanofibers and textiles,” vol. 42, pp. 261–272, 2001.

[18] C. J. Thompson, G. G. Chase, A. L. Yarin, and D. H. Reneker, “Effects of parameters on nanofiber diameter determined from electrospinning model,” vol. 48, 2007.

[19] M. Zhu, J. Han, F. Wang, W. Shao, and R. Xiong, “Electrospun Nanofibers Membranes for Effective Air Filtration,” vol. 1600353, pp. 1–27.