



IVs11-001

Estimativa de parâmetros cinéticos na polimerização radicalar do D-limoneno

Metzker, L.F.(1); Vieira, R.P.(1);

(1) UNICAMP;

O D-limoneno é um típico hidrocarboneto insaturado terpênico monocíclico, podendo ser encontrado em óleos essenciais de cítricos, tais como laranja, tangerina, toranja e limão. Este composto apresenta um alto potencial na produção polimérica para aplicações como adesivos e revestimentos, uma vez que é extraído de óleos essenciais de produtos sustentáveis e renováveis, além da produção do monômero ser economicamente viável. Contudo, embora a matéria prima e a aplicabilidade do polímero sejam concretas, viáveis e muito bem definidas, há um grande empecilho na produção do polímero em larga escala: o seu processo de polimerização, que está ligado à baixa capacidade reativa do D-limoneno, implicando na produção de polímeros com baixo rendimento e massa molar. Visando compreender melhor o processo, esta pesquisa aborda uma modelagem computacional utilizando modelos de polimerização mais amplos e que permitem contemplar os testes experimentais já realizados anteriormente na literatura, desta forma, sendo possível estudar condições operacionais que possibilitariam suprir as principais dificuldades encontradas no processo. Em vista disto, este trabalho fornece resultados simples e efetivos para a obtenção de parâmetros cinéticos do processo utilizando o Solver do EXCEL. Com isto, uma análise do processo por meio de simulações foi realizada. Simulou-se a polimerização de limoneno iniciada por peróxido de benzoíla em 86 °C. Para encontrar os parâmetros, foi utilizado como base os resultados experimentais da literatura, paralelamente ao método dos momentos para previsão de massa molar e dispersidade. Construiu-se uma planilha simulatória que descreve o processo de polimerização calculando numericamente a constante cinética de propagação (k_p) e a ordem de reação (n). O ajuste do modelo aos dados experimentais indicou um valor de $n = 1,385$ e $k_p = 72,4 \text{ mol.L}^{-1}.\text{s}^{-1}$, sugerindo um forte comportamento não ideal do processo. A comparação dos dados experimentais e de simulação foi satisfatória para os ensaios em que houve variação na concentração inicial de limoneno. Para os ensaios em que a variação se dava na concentração inicial de iniciador, alguns desvios significativos foram observados. Porém, de modo geral, os parâmetros estimados foram cruciais para a simulação do processo. Em suma, este trabalho fornece uma ferramenta computacional simples e experimentalmente válida para obtenção de conversão e massa molar do polímero quando alteram-se concentrações de iniciador e monômero.