COEQ
CONGRESSO ONLINE
DE ENGENHARIA QUÍMICA

ISBN: 978-65-86861-56-3

MODELAGEM MOLECULAR APLICADA À VULCANIZAÇÃO DE BORRACHAS

Congresso Online de Engenharia Química, 1ª edição, de 09/11/2020 a 12/11/2020
ISBN dos Anais: 978-65-86861-56-3

COSTA; Helson Moreira DA [1], RAMOS; Valéria Dutra [2]

RESUMO

Introdução: A vulcanização de elastômeros ou borrachas pode ser compreendida como um processo de reticulação, onde as macromoléculas individuais presentes no polímero são convertidas em uma rede tridimensional elástica. A borracha natural (NR) e o copolímero de estireno-butadieno (SBR) são vulcanizados através de sistemas onde aceleradores orgânicos e ativadores estão sempre presentes. Há algum tempo, nosso grupo de pesquisa tem buscado substituir o ácido esteárico nas composições usuais de NR e SBR por produtos naturais - óleos de amendoim, linhaça e coco, além da cera de abelha. Em linhas gerais, os experimentos demonstraram que os óleos vegetais apresentam um papel ativador nas composições elastoméricas, embora com uma ordem de eficiência diferenciada na formação de ligações cruzadas. A cera de abelha não revelou uma atividade viável no processo. Nas últimas décadas, a modelagem molecular (MM) surgiu como faceta poderosa que proporcionou um melhor entendimento a nível molecular dos mecanismos de ação das moléculas. Uma vez que a MM permite não apenas estimar as propriedades específicas de um composto, mas também auxilia na interpretação de reações químicas, a ideia desse trabalho é utilizar os recursos computacionais exigidos pela MM para a melhor compreensão teórica e validação de dados experimentais. **Objetivos:** Através do método semiempírico AM1, duas reações principais do processo de vulcanização foram escolhidas, modeladas e foi traçado um paralelo com os experimentos realizados. **Metodologia:** O processo de modelagem molecular foi conduzido através do programa HyperChem 7.0. O método AM1 (*Austin Model* 1) foi selecionado, pois é um dos mais usados entre todos os métodos semiempíricos para moléculas orgânicas. O algoritmo de otimização de Polak-Ribiere (gradiente conjugado) foi empregado para a minimização de energia com as opções de critério de convergência do gradiente RMS de 0,01 $kcal.mol^{-1}$ ou um máximo de 1000 ciclos de interações; e, a molécula disposta no vácuo. **Resultados e Discussão:** A solubilidade na matriz elastomérica e aumento da reatividade ocasionada pela diminuição da dureza são os fatores que permitem que ácidos graxos insaturados com 12 carbonos ou mais sejam úteis na vulcanização. Porém, ácidos graxos com cadeias carbônicas excessivamente grandes como o ácido lignocérico (24 átomos de C) não são ativadores eficientes em função do impedimento estérico gerado nas espécies químicas derivadas. Para ácidos graxos com 18 carbonos, a presença de insaturações permite uma diminuição da dureza das espécies, cuja magnitude depende do acelerador considerado no sistema de

[1] IPRJ/UERJ e UNESA/RJ, moreirahelson@gmail.com
[2] UNESA/RJ, valdutraramos@gmail.com

vulcanização. Porém, o ganho de reatividade das espécies, em particular, do complexo sulfurante, não se reflete em ganho efetivo de eficiência. As insaturações acabam por, provavelmente, permitir maior número de reações laterais indesejáveis, o que atenua a ação dos óleos de linhaça e amendoim, ricos em ácidos graxos insaturados, como ativadores. **Conclusões:** A modelagem molecular empregada corroborou os resultados experimentais e, desta forma, é uma importante ferramenta de avaliação de novos produtos que podem ser incorporados em formulações elastoméricas.

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem molecular, Produtos naturais, Vulcanização

[1] IPRJ/UERJ e UNESA/RJ, moreirahelson@gmail.com
[2] UNESA/RJ, valdutraramos@gmail.com