

## Modelagem Matemática e Simulação da Síntese de Poli(Succinato de Butileno) (PBS) via Policondensação.

Emerson Parazzi Lyra\*, Liliane Maria Ferrareso Lona.

### Resumo

No âmbito dos processos de policondensação, o conteúdo deste trabalho versa sobre a modelagem matemática e simulação da síntese do poliéster alifático Poli(Succinato de Butileno) (PBS), sendo estudados os efeitos da temperatura e razão molar inicial dos monômeros no meio de reação.

### Palavras-chave:

PBS, policondensação, modelagem matemática.

### Introdução

O Poli(Succinato de Butileno) (PBS) é um poliéster alifático que vem sendo amplamente investigado principalmente por suas propriedades mecânicas, boa processabilidade e biodegradabilidade.

Desta forma, o principal objetivo deste trabalho remete a modelagem matemática e simulação computacional do processo de síntese de PBS, baseando-se para isto no trabalho desenvolvido por Hu *et al.* (2010), tendo em vista a escassez de registros do assunto na literatura.

### Resultados e Discussão

Ácido succínico (SA) esterifica na presença de 1,4-butanodiol (BDO) dando origem ao PBS. A Tabela 1 refere-se às reações observadas e consideradas na modelagem matemática para síntese do copoliéster em questão, sendo as espécies  $\sim\text{COOH}$  a carboxila terminal do SA,  $B$  o monômero BDO,  $\sim tB$  um grupo hidroxil butil éster,  $\sim bB$  um grupo butil diéster e  $\text{THF}$  é a molécula de tetraidrofurano.

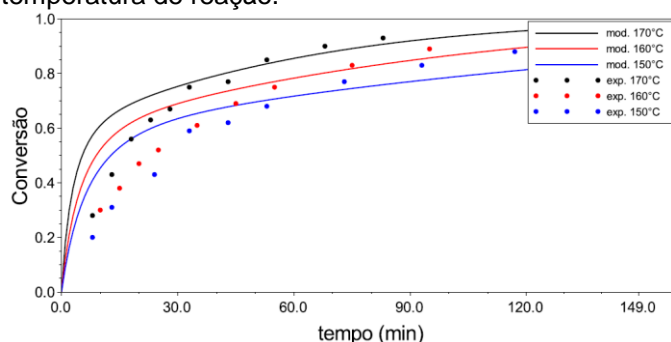
**Tabela 1.** Conjunto de reações consideradas na modelagem matemática para síntese de PBS.

$\sim\text{COOH} + B \rightarrow \sim tB + \text{H}_2\text{O}$	(Eq. 1)
$\sim\text{COOH} + \sim tB \rightarrow \sim bB + \text{H}_2\text{O}$	(Eq. 2)
$2\sim tB \rightleftharpoons \sim bB + B$	(Eq. 3)
$B \rightarrow \text{THF} + \text{H}_2\text{O}$	(Eq. 4)
$\sim tB \rightarrow \sim\text{COOH} + \text{THF}$	(Eq. 5)

\* Retirado de Hu *et al.* (2010).

O sistema de equações diferenciais inerentes as espécies participantes das reações da Tabela 1, foi implementado computacionalmente na ferramenta *Xcos* do *software Scilab 5.5.1*, sendo o comportamento do modelo desenvolvido para o cálculo da conversão apresentado na Figura 1.

**Figura 1.** Perfis de conversão do PBS variando-se a temperatura de reação.



\*Os símbolos remetem a dados experimentais retirados de Hu *et al.* (2010), as linhas contínuas remetem ao modelo desenvolvido neste trabalho, considerando a razão molar inicial de BDO/SA igual 1,5.

### Conclusões

Ainda que o modelo desenvolvido tenha boa representatividade para a conversão, o ajuste foi menos satisfatório em prever a concentração de THF em função do tempo. Cabe ressaltar que até o momento somente dados experimentais de Hu *et al.* (2010) estão disponíveis em literatura. Espera-se um melhor o ajuste do modelo quando outros dados experimentais (ou de literatura ou obtidos pelos autores) possam ser usados também para a validação do modelo.

Hu, L.; Wu, L.; Song, B. Kinetics and Modeling of Melt Polycondensation for Synthesis of Poly[(butylene succinate)-co-(butylene terephthalate)], 1 – Esterification. *Macromol. React. Eng.* **2010**, *4*, 621-632.