



XVI congresso interno de iniciação científica

Ginásio Multidisciplinar da Unicamp
24 a 25 de setembro de 2008



T1143

SIMULAÇÃO DA POLIMERIZAÇÃO VIA RADICAL LIVRE CONTROLADA USANDO MECANISMO RAFT (TRANSFERÊNCIA DE CADEIA REVERSÍVEL POR ADIÇÃO-FRAGMENTAÇÃO)

Alexandre Khae Wu Navarro (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Liliane Maria Ferrareso Lona (Orientadora), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

Neste projeto foi realizada a simulação e validação de um processo para a polimerização via radical livre controlada através do método RAFT (Transferência de Cadeia Reversível por Adição-Fragmentação), seguindo o desenvolvimento de um modelo matemático baseado no método dos momentos de Franco, 2007 (1). O método RAFT é objeto de estudo tecnológico recente, sendo o modelo estudado para validação o primeiro modelo matemático e computacional desenvolvido para descrever esta via de polimerização. Devido à falta de dados experimentais, este não havia sido amplamente validado anteriormente. A partir de uma colaboração com um laboratório da Escola de Engenharia de Lorena – USP para o fornecimento de dados experimentais procurou-se estudar e ajustar o modelo proposto alterando-se os parâmetros cinéticos de forma a representar o sistema experimental utilizado. Para tanto, o modelo de Franco, 2007 (1) foi estudado para verificar o comportamento e sensibilidade do modelo às condições operacionais. Seguiu-se uma pesquisa dos parâmetros em literatura e realizaram-se diversas simulações para cobrir todas as condições operacionais estudadas experimentalmente e ajustar os parâmetros aos dados. Uma boa concordância entre os dados experimentais e o modelo computacional foi observada.

Polimerização - Reator - RAFT