



E0402

### **SIMULAÇÃO E AJUSTE DE PARÂMETROS DA POLIMERIZAÇÃO RADICALAR VIVA EM MASSA**

Raquel Saito Nérís (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Liliane Maria Ferrareso Lona (Orientadora), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

A polimerização de radical controlada (PRC) tem sido uma técnica muito utilizada na produção de polímeros com micro estruturas altamente padronizadas. Neste trabalho, a partir da variação de parâmetros no programa, é possível verificar uma melhor eficiência na reação de polimerização, obtendo polímeros com uma estrutura macromolecular definida. A linguagem utilizada foi o Fortran. A polimerização escolhida foi a NMRP, a qual é uma polimerização via radical livre controlada que envolve a adição de um radical nitróxido estável para capturar as cadeias em crescimento ou em propagação. Além disso, a utilização da polimerização de estireno com os iniciadores químicos BPO, AIBN e TBEC também foram escolhidos para o estudo. Como exemplo de análise do processo, diminuindo concentrações do agente controlador, maiores valores de pesos moleculares foram observados. Em outro sentido, a taxa de polimerização diminui quando se utiliza o fator de eficiência menor que uma unidade, este sendo definido como uma fração do agente controlador capaz de formar um radical nitróxido, por isso foi utilizada a reação com fator de eficiência igual a 0,7, o qual obteve melhores resultados para a polimerização do estireno.

Polimerização - Simulação - Fortran