

Simulação da Cinética de Formação da Fração Gel em Sistema Estireno-Divinilbenzeno via Monte Carlo

Isabela Chiara Allam da Silva^a, Bruno Francisco Oechsler^b, Amanda Lemette Teixeira Brandão^{a*}

^aPUC-Rio, Departamento de Engenharia Química e de Materiais, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^bUniversidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico – Engenharia Química e Engenharia de Alimentos

*amanda.lemette@puc-rio.br

RESUMO

O Poli(estireno-co-divinilbenzeno) possui diversas aplicações industriais relevantes, como a utilização como recheio em colunas cromatográficas (Huck e Bonn, 2005) e suporte para biocatalisadores (Castiglioni et al., 2016). Sua obtenção ocorre por meio da copolimerização via radicais livres entre estireno (ES) e divinilbenzeno (DVB). No processo abordado, ocorre a formação de uma fração de gel caracterizada como um copolímero insolúvel com alto grau de reticulação em relação ao produto polimérico em solução (Oechsler, 2016). Esse fenômeno acarreta instabilidade na operação contínua de reatores industriais, e impossibilita a solubilização dessas cadeias para caracterização via GPC. Nesse contexto, o desenvolvimento de modelos cinéticos capazes de prever a contribuição das frações solúvel e gel na distribuição de massa molar do copolímero gerado em solução é essencial para apontar possíveis alterações para mitigar a formação de gel. O presente trabalho propôs um mecanismo cinético, para a produção do copolímero reticulado em solução, que inclui a reincorporação de duplas pendentes das cadeias dormentes. Para este fim, foi aplicado o método de Monte Carlo (MC) (Brandão et al., 2015) baseado na divisão das moléculas em cadeias lineares e grupos com reticulações. A validação do modelo ocorreu via comparação com dados experimentais coletados de trabalhos publicados (Oechsler, 2016). As previsões geradas incluíram dados de conversão, massas molares médias e distribuição de massas molares com distinção entre fração solúvel e gel. A partir da análise de sensibilidade das constantes cinéticas foi possível observar que a reincorporação não altera a conversão, mas possui elevado impacto nas massas molares e suas distribuições. O modelo final simulou o sistema de forma adequada, apresentando uma composição média de 0,064% de DVB nas cadeias formadas.

Palavras-chave: Fração de Gel; Monte Carlo; Modelo Cinético; Poli(estireno-co-divinilbenzeno).

Agradecimentos: O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001 e da Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) através do programa PRH-ANP (2025/02828-3), administrado pela FAPESP.

Referências

- A. L. T. Brandão, J. B. P. Soares, J. C. Pinto e A. L. Alberton: When Polymer Reaction Engineers Play Dice: Applications of Monte Carlo Models in PRE, *Macromol. React. Eng.* (9), 141-185, 2015.
- G. L. Castiglioni, J. Cuellar, R. Rodrigo, J. A. V. Costa e R. Monte-Alegre: Application of Poly(styrene-co-divinylbenzene) Macroporous Microparticles as a Catalyst Support in the Enzymatic Synthesis of Biodiesel, *J. Polym. Environ.* (24), 264-273, 2016.
- C. W. Huck e G. K. Bonn: Poly(Styrene-Divinylbenzene) Based Media for Liquid Chromatography, *Chem. Eng. Technol.* (28), 1457-1472, 2005.
- B. F. Oechsler: Análise Dinâmica de Modelos de Mistura Imperfeita em Reatores de Polimerização via Radicais Livres em Solução, Tese de Doutorado, Programa de Engenharia Química/COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2016.