



## Uso de Cromatografia Gasosa Inversa para a Determinação de IDAC de Solventes em Soluções Poliméricas

Maria Lina Strack<sup>1</sup>, Paula Bettio Staudt<sup>2</sup>

Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

<sup>1</sup>Bolsista BIC/UFRGS; <sup>2</sup>Orientadora

### Introdução

A busca por substâncias poliméricas obtidas a partir de fontes renováveis aumenta a cada ano e neste contexto o poli(3-hidroxi-butirato) (P3HB) tem se mostrado uma alternativa interessante devido às suas propriedades mecânicas similares a polímeros convencionais, como o polipropileno. Entretanto, diversas dificuldades são encontradas na produção do P3HB em escala industrial<sup>1</sup>. Em uma das etapas de sua obtenção, é necessário extraí-lo do meio de cultivo.

Para realizar este processo é essencial o conhecimento de solventes adequados e ambientalmente favoráveis.

O coeficiente de atividade em diluição infinita (IDAC, em inglês) é uma propriedade termodinâmica que determina o nível de interação entre duas substâncias, quanto menor o valor de IDAC, maior a compatibilidade entre os componentes. Portanto, é possível utilizar a determinação de coeficientes de atividade para encontrar bons solventes para o P3HB.

### Metodologia

Para determinar os valores de IDAC foi utilizada a técnica de cromatografia gasosa inversa<sup>2</sup>, onde a fase estacionária é composta pela substância de interesse, neste caso o polímero P3HB. A coluna cromatográfica (aço inox, 65 cm de comprimento e 6,35 mm de diâmetro) foi preenchida com um recheio composto por um suporte inerte (Chromosorb P) revestido com uma camada de polímero (Figura 1a). Após, o preenchimento da coluna (Figura 1b), a mesma foi condicionada com fluxo de gás inerte até estabilidade da pressão de entrada (por aproximadamente 8 horas, Figura 1c). Para a determinação do IDAC foram injetadas pequenas quantidades de solventes (Figura 1d) e através dos tempos de retenção das amostras foi possível determinar o IDAC da substância injetada no polímero. Foram analisadas 13 substâncias em 6 temperaturas, 100 a 150 °C em intervalos de 10 °C.



Figura 1: (a) recheio da coluna; (b) coluna preenchida; (c) cromatógrafo gasoso durante condicionamento; (d) injeção da amostra.

### Resultados

Os resultados de IDAC para 3 temperaturas e 5 diferentes solventes são mostrados na tabela 1 junto com seu intervalo de confiança. É possível observar que compostos polares e halogenados, como o hexafluoro-2-propanol (HFIP) e o clorofórmio, apresentaram baixos valores de IDAC o que indica alta compatibilidade com o polímero. Já substâncias apolares, como o hexano, mostraram ter pouca afinidade com o P3HB e portanto, altos valores de IDAC.

Tabela 1: Valores de IDAC base mássica obtidos para cinco solventes em duas colunas de P3HB (20 % e 25 %) em diferentes temperaturas

	100 °C	130 °C	150 °C
HFIP	1,035 ± 0,08	1,527 ± 0,082	1,757 ± 0,053
Hexano	59,782 ± 6,499	59,219 ± 5,406	53,635 ± 5,742
Clorofórmio	8,277 ± 0,279	8,575 ± 0,666	8,073 ± 0,784
Benzeno	21,723 ± 2,020	21,614 ± 1,504	18,828 ± 2,083
Ciclohexano	45,190 ± 5,106	42,281 ± 3,723	36,537 ± 2,708

### Conclusões

Os valores de IDAC foram determinados através da cromatografia gasosa inversa para treze solventes em P3HB em seis temperaturas. Observou-se uma grande dependência dos valores de IDAC com a polaridade e estrutura das substâncias estudadas.

Com base nos resultados obtidos, é possível concluir que compostos halogenados têm interações mais fortes com o P3HB do que outras substâncias e podem ser opções viáveis de solventes. Sugere-se uma investigação com novos solventes, como líquidos iônicos que são ambientalmente favoráveis e podem melhorar a produção do P3HB via rotas biológicas.

### Referências

1. Faccin, D. J. L.; Corrêa, M. P.; Rech, R.; Ayub, M. A. Z.; Secchi, A. R.; Cardozo, N. S. M. Modeling P(3HB) production by *Bacillus megaterium*. *J. Chem. Technol. Biotechnol.* 87 (2012), 325-333.
2. Galin, M.; Rupprecht. Study by gas-liquid chromatography of the interactions between linear or branched polystyrenes and solvents in the temperature range 60°C-200°C. *Polymer.* 19 (1978), 506-512.