

175

MODELAGEM DA REAÇÃO DE FUNCIONALIZAÇÃO DE POLIPROPILENO COM VINILSILANO.

Fernanda Andreoli Chilanti, Argimiro R. Secchi, Sônia M. B. Nachtigall, Nilo Sérgio M. Cardozo (Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, UFRGS).

O desenvolvimento de um simulador para reações de polimerização ou modificação de polímeros é fundamental para a predição das características estruturais do produto a partir do conhecimento das condições utilizadas no processo. Neste trabalho é feita a modelagem da reação de funcionalização do polipropileno com moléculas de vinilsilano através de mecanismo radicalar. Foi desenvolvido um modelo cinético específico para a funcionalização por radicais livres que considera as reações de iniciação, funcionalização, transferência de radicais, cisão β , terminação por combinação e terminação por desproporcionamento. O modelo utiliza o método dos momentos para chegar a expressões que relacionem os parâmetros da curva de distribuição de pesos moleculares com as constantes cinéticas das reações consideradas e as concentrações iniciais dos reagentes, permitindo prever a forma da curva de distribuição de peso molecular bem como o nível de incorporação de vinilsilano no produto final. Este modelo está sendo implementado em linguagem C, sendo que o ajuste das constantes cinéticas e o teste do modelo será feito a partir de dados experimentais obtidos no Instituto de Química da UFRGS. (FINEP)