

Engenharia Química

Simulação Computacional do Crescimento de Cristais de Polianilina

Filipe de Almeida Rocha - 1º módulo de Engenharia Química, UFLA, bolsista PIBITI/CNPq.

Alfredo Rodrigues de Sena Neto - Orientador DEG, UFLA. - Orientador(a)

Júlio César Ugucioni - Coorientador DFI, UFLA.

Resumo

A simulação computacional é uma ferramenta recente, que devido a sua ampla gama de aplicações e suas vantagens sobre os métodos de experimentação tradicionais, vem ganhando cada vez mais espaço tanto na indústria como no meio acadêmico. A aplicação desta ferramenta na simulação de reações químicas permite o estudo de como as propriedades do produto formado se alteram quando algum parâmetro da reação como por exemplo temperatura, concentração de determinado reagente, pH do meio reacional, entre outros são modificados. Com isso, é possível determinar os valores dos parâmetros da reação que são necessários para gerar o produto com as propriedades de interesse sem que se gaste tempo e reagentes testando as diferentes condições de síntese. Dessa forma, o presente estudo teve como objetivo a análise da influência da temperatura, do tempo de reação e da concentração de unidades cristalinas no processo de cristalização de cadeias de polianilina (PANI). Para isso, foi elaborado um algoritmo em linguagem de programação C++, que simulava o crescimento de um cristal de polianilina. Nesse código, como variáveis de entrada, eram inseridos o tamanho do sistema (matriz quadrada, 2D), a concentração de unidades cristalinas e a temperatura do sistema. Como resultado da simulação obteve-se uma matriz que representava o sistema. Esse resultado era representado de forma gráfica utilizando o software OriginPro® 8.6. Por meio de diferentes rotinas que simulavam variações nas variáveis anteriormente descritas foi possível concluir que a formação do cristal de PANI, quando era considerado somente a aleatoriedade do sistema, leva a formações de estruturas cristalinas ramificadas. Porém, ao levar em conta as energias de atração e repulsão causadas pelas orientações das cadeias, o cristal resultante não apresentou ramificações, sendo seu formato dependente da temperatura e da concentração do sistema. Este resultado está em consonância com os encontrados na literatura (Zhang; Muthukumar, 2007) para simulações de diferentes polímeros.

Palavras-Chave: Polímero, Cristalização, Simulação.

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: <https://youtu.be/Y5lhia42gqQ>