

Desenvolvimento e Transferência de Tecnologia na Engenharia Química 2

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua
(Organizador)

Atena
Editora

Ano 2021

Desenvolvimento e Transferência de Tecnologia na Engenharia Química 2

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua
(Organizador)

Atena
Editora

Ano 2021

Editora Chefe

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Assistentes Editoriais

Natalia Oliveira

Bruno Oliveira

Flávia Roberta Barão

Bibliotecária

Janaina Ramos

Projeto Gráfico e Diagramação

Natália Sandrini de Azevedo

Camila Alves de Cremona

Luiza Alves Batista

Maria Alice Pinheiro

Imagens da Capa

Shutterstock

Edição de Arte

Luiza Alves Batista

Revisão

Os Autores

2021 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do Texto © 2021 Os autores

Copyright da Edição © 2021 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição-Não-Comercial-NãoDerivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

Conselho Editorial

Ciências Humanas e Sociais Aplicadas

Prof. Dr. Alexandre Jose Schumacher – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná

Prof. Dr. Américo Junior Nunes da Silva – Universidade do Estado da Bahia

Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Prof. Dr. Antonio Gasparetto Júnior – Instituto Federal do Sudeste de Minas Gerais

Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília
Prof. Dr. Carlos Antonio de Souza Moraes – Universidade Federal Fluminense
Prof. Dr. Crisóstomo Lima do Nascimento – Universidade Federal Fluminense
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa
Prof. Dr. Daniel Richard Sant'Ana – Universidade de Brasília
Prof. Dr. Deyvison de Lima Oliveira – Universidade Federal de Rondônia
Profª Drª Dilma Antunes Silva – Universidade Federal de São Paulo
Prof. Dr. Edvaldo Antunes de Farias – Universidade Estácio de Sá
Prof. Dr. Elson Ferreira Costa – Universidade do Estado do Pará
Prof. Dr. Eloi Martins Senhora – Universidade Federal de Roraima
Prof. Dr. Gustavo Henrique Cepolini Ferreira – Universidade Estadual de Montes Claros
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionale delle Figlie de Maria Ausiliatrice
Prof. Dr. Jadson Correia de Oliveira – Universidade Católica do Salvador
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins
Prof. Dr. Luis Ricardo Fernandes da Costa – Universidade Estadual de Montes Claros
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Pereira da Silva – Pontifícia Universidade Católica de Campinas
Profª Drª Maria Luzia da Silva Santana – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul
Prof. Dr. Pablo Ricardo de Lima Falcão – Universidade de Pernambuco
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Rita de Cássia da Silva Oliveira – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Prof. Dr. Rui Maia Diamantino – Universidade Salvador
Prof. Dr. Saulo Cerqueira de Aguiar Soares – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Vanessa Ribeiro Simon Cavalcanti – Universidade Católica do Salvador
Prof. Dr. William Cleber Domingues Silva – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

Ciências Agrárias e Multidisciplinar

Prof. Dr. Alexandre Igor Azevedo Pereira – Instituto Federal Goiano
Prof. Dr. Arinaldo Pereira da Silva – Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará
Prof. Dr. Antonio Pasqualetto – Pontifícia Universidade Católica de Goiás
Profª Drª Carla Cristina Bauermann Brasil – Universidade Federal de Santa Maria
Prof. Dr. Cleberton Correia Santos – Universidade Federal da Grande Dourados
Profª Drª Diocléa Almeida Seabra Silva – Universidade Federal Rural da Amazônia
Prof. Dr. Écio Souza Diniz – Universidade Federal de Viçosa
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul
Prof. Dr. Fágner Cavalcante Patrocínio dos Santos – Universidade Federal do Ceará
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Prof. Dr. Jael Soares Batista – Universidade Federal Rural do Semi-Árido
Prof. Dr. Jayme Augusto Peres – Universidade Estadual do Centro-Oeste
Prof. Dr. Júlio César Ribeiro – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Profª Drª Lina Raquel Santos Araújo – Universidade Estadual do Ceará
Prof. Dr. Pedro Manuel Villa – Universidade Federal de Viçosa
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará
Profª Drª Talita de Santos Matos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Tiago da Silva Teófilo – Universidade Federal Rural do Semi-Árido
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas

Ciências Biológicas e da Saúde

Prof. Dr. André Ribeiro da Silva – Universidade de Brasília
Profª Drª Anelise Levay Murari – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Benedito Rodrigues da Silva Neto – Universidade Federal de Goiás
Profª Drª Daniela Reis Joaquim de Freitas – Universidade Federal do Piauí
Profª Drª Débora Luana Ribeiro Pessoa – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Douglas Siqueira de Almeida Chaves – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri
Profª Drª Elizabeth Cordeiro Fernandes – Faculdade Integrada Medicina
Profª Drª Eleuza Rodrigues Machado – Faculdade Anhanguera de Brasília
Profª Drª Elane Schwinden Prudêncio – Universidade Federal de Santa Catarina
Profª Drª Eysler Gonçalves Maia Brasil – Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Prof. Dr. Ferlando Lima Santos – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Profª Drª Fernanda Miguel de Andrade – Universidade Federal de Pernambuco
Prof. Dr. Fernando Mendes – Instituto Politécnico de Coimbra – Escola Superior de Saúde de Coimbra
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria
Prof. Dr. Helio Franklin Rodrigues de Almeida – Universidade Federal de Rondônia
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. Jefferson Thiago Souza – Universidade Estadual do Ceará
Prof. Dr. Jesus Rodrigues Lemos – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Jônatas de França Barros – Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. José Max Barbosa de Oliveira Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Prof. Dr. Luís Paulo Souza e Souza – Universidade Federal do Amazonas
Profª Drª Magnólia de Araújo Campos – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. Marcus Fernando da Silva Praxedes – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Profª Drª Maria Tatiane Gonçalves Sá – Universidade do Estado do Pará
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federacl do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados
Profª Drª Regiane Luz Carvalho – Centro Universitário das Faculdades Associadas de Ensino
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Welma Emidio da Silva – Universidade Federal Rural de Pernambuco

Ciências Exatas e da Terra e Engenharias

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto
Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie
Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás
Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná
Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás
Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará
Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande

Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Sidney Gonçalves de Lima – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

Linguística, Letras e Artes

Profª Drª Adriana Demite Stephani – Universidade Federal do Tocantins
Profª Drª Angeli Rose do Nascimento – Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro
Profª Drª Carolina Fernandes da Silva Mandaji – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Profª Drª Denise Rocha – Universidade Federal do Ceará
Profª Drª Edna Alencar da Silva Rivera – Instituto Federal de São Paulo
Profª Drª Fernanda Tonelli – Instituto Federal de São Paulo,
Prof. Dr. Fabiano Tadeu Grazioli – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Profª Drª Keyla Christina Almeida Portela – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná
Profª Drª Miraniide Oliveira Neves – Instituto de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará
Profª Drª Sandra Regina Gardacho Pietrobon – Universidade Estadual do Centro-Oeste
Profª Drª Sheila Marta Carregosa Rocha – Universidade do Estado da Bahia

Conselho Técnico Científico

Prof. Me. Abrãao Carvalho Nogueira – Universidade Federal do Espírito Santo
Prof. Me. Adalberto Zorzo – Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza
Prof. Dr. Adaylson Wagner Sousa de Vasconcelos – Ordem dos Advogados do Brasil/Seccional Paraíba
Prof. Dr. Adilson Tadeu Basquerote Silva – Universidade para o Desenvolvimento do Alto Vale do Itajaí
Prof. Dr. Alex Luis dos Santos – Universidade Federal de Minas Gerais
Prof. Me. Alessandro Teixeira Ribeiro – Centro Universitário Internacional
Profª Ma. Aline Ferreira Antunes – Universidade Federal de Goiás
Profª Drª Amanda Vasconcelos Guimarães – Universidade Federal de Lavras
Prof. Me. André Flávio Gonçalves Silva – Universidade Federal do Maranhão
Profª Ma. Andréa Cristina Marques de Araújo – Universidade Fernando Pessoa
Profª Drª Andrezza Lopes – Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento Acadêmico
Profª Drª Andrezza Miguel da Silva – Faculdade da Amazônia
Profª Ma. Anelisa Mota Gregoleti – Universidade Estadual de Maringá
Profª Ma. Anne Karynne da Silva Barbosa – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Antonio Hot Pereira de Faria – Polícia Militar de Minas Gerais
Prof. Me. Armando Dias Duarte – Universidade Federal de Pernambuco
Profª Ma. Bianca Camargo Martins – UniCesumar
Profª Ma. Carolina Shimomura Nanya – Universidade Federal de São Carlos
Prof. Me. Carlos Antônio dos Santos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Me. Carlos Augusto Zilli – Instituto Federal de Santa Catarina
Prof. Me. Christopher Smith Bignardi Neves – Universidade Federal do Paraná
Profª Drª Cláudia de Araújo Marques – Faculdade de Música do Espírito Santo
Profª Drª Cláudia Taís Siqueira Cagliari – Centro Universitário Dinâmica das Cataratas
Prof. Me. Clécio Danilo Dias da Silva – Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Me. Daniel da Silva Miranda – Universidade Federal do Pará
Profª Ma. Daniela da Silva Rodrigues – Universidade de Brasília
Profª Ma. Daniela Remião de Macedo – Universidade de Lisboa
Profª Ma. Dayane de Melo Barros – Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Me. Douglas Santos Mezacas – Universidade Estadual de Goiás
Prof. Me. Edevaldo de Castro Monteiro – Embrapa Agrobiologia
Prof. Me. Edson Ribeiro de Britto de Almeida Junior – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Me. Eduardo Gomes de Oliveira – Faculdades Unificadas Doctum de Cataguases
Prof. Me. Eduardo Henrique Ferreira – Faculdade Pitágoras de Londrina
Prof. Dr. Edwaldo Costa – Marinha do Brasil
Prof. Me. Eliel Constantino da Silva – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita
Prof. Me. Ernane Rosa Martins – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás
Prof. Me. Euvaldo de Sousa Costa Junior – Prefeitura Municipal de São João do Piauí
Prof. Dr. Everaldo dos Santos Mendes – Instituto Edith Theresa Hedwing Stein
Prof. Me. Ezequiel Martins Ferreira – Universidade Federal de Goiás
Prof^a Ma. Fabiana Coelho Couto Rocha Corrêa – Centro Universitário Estácio Juiz de Fora
Prof. Me. Fabiano Eloy Atílio Batista – Universidade Federal de Viçosa
Prof. Me. Felipe da Costa Negrão – Universidade Federal do Amazonas
Prof. Me. Francisco Odécio Sales – Instituto Federal do Ceará
Prof. Me. Francisco Sérgio Lopes Vasconcelos Filho – Universidade Federal do Cariri
Prof^a Dr^a Germana Ponce de Leon Ramírez – Centro Universitário Adventista de São Paulo
Prof. Me. Gevair Campos – Instituto Mineiro de Agropecuária
Prof. Me. Givanildo de Oliveira Santos – Secretaria da Educação de Goiás
Prof. Dr. Guilherme Renato Gomes – Universidade Norte do Paraná
Prof. Me. Gustavo Krahl – Universidade do Oeste de Santa Catarina
Prof. Me. Helton Rangel Coutinho Junior – Tribunal de Justiça do Estado do Rio de Janeiro
Prof^a Ma. Isabelle Cerqueira Sousa – Universidade de Fortaleza
Prof^a Ma. Jaqueline Oliveira Rezende – Universidade Federal de Uberlândia
Prof. Me. Javier Antonio Albornoz – University of Miami and Miami Dade College
Prof. Me. Jhonatan da Silva Lima – Universidade Federal do Pará
Prof. Dr. José Carlos da Silva Mendes – Instituto de Psicologia Cognitiva, Desenvolvimento Humano e Social
Prof. Me. Jose Elyton Batista dos Santos – Universidade Federal de Sergipe
Prof. Me. José Luiz Leonardo de Araujo Pimenta – Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria Uruguay
Prof. Me. José Messias Ribeiro Júnior – Instituto Federal de Educação Tecnológica de Pernambuco
Prof^a Dr^a Juliana Santana de Curcio – Universidade Federal de Goiás
Prof^a Ma. Juliana Thaisa Rodrigues Pacheco – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Prof^a Dr^a Kamilly Souza do Vale – Núcleo de Pesquisas Fenomenológicas/UFGA
Prof. Dr. Kárpio Márcio de Siqueira – Universidade do Estado da Bahia
Prof^a Dr^a Karina de Araújo Dias – Prefeitura Municipal de Florianópolis
Prof. Dr. Lázaro Castro Silva Nascimento – Laboratório de Fenomenologia & Subjetividade/UFRP
Prof. Me. Leonardo Tullio – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Prof^a Ma. Lillian Coelho de Freitas – Instituto Federal do Pará
Prof^a Ma. Lilian de Souza – Faculdade de Tecnologia de Itu
Prof^a Ma. Liliani Aparecida Sereno Fontes de Medeiros – Consórcio CEDERJ
Prof^a Dr^a Lívia do Carmo Silva – Universidade Federal de Goiás
Prof. Dr. Lucio Marques Vieira Souza – Secretaria de Estado da Educação, do Esporte e da Cultura de Sergipe
Prof. Dr. Luan Vinicius Bernardelli – Universidade Estadual do Paraná
Prof^a Ma. Luana Ferreira dos Santos – Universidade Estadual de Santa Cruz
Prof^a Ma. Luana Vieira Toledo – Universidade Federal de Viçosa
Prof. Me. Luis Henrique Almeida Castro – Universidade Federal da Grande Dourados
Prof. Me. Luiz Renato da Silva Rocha – Faculdade de Música do Espírito Santo
Prof^a Ma. Luma Sarai de Oliveira – Universidade Estadual de Campinas
Prof. Dr. Michel da Costa – Universidade Metropolitana de Santos
Prof. Me. Marcelo da Fonseca Ferreira da Silva – Governo do Estado do Espírito Santo
Prof. Dr. Marcelo Máximo Purificação – Fundação Integrada Municipal de Ensino Superior
Prof. Me. Marcos Aurelio Alves e Silva – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Profª Ma. Maria Elanny Damasceno Silva – Universidade Federal do Ceará
Profª Ma. Marileila Marques Toledo – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri
Prof. Dr. Pedro Henrique Abreu Moura – Empresa de Pesquisa Agropecuária de Minas Gerais
Prof. Me. Pedro Panhoca da Silva – Universidade Presbiteriana Mackenzie
Profª Drª Poliana Arruda Fajardo – Universidade Federal de São Carlos
Prof. Me. Rafael Cunha Ferro – Universidade Anhembi Morumbi
Prof. Me. Ricardo Sérgio da Silva – Universidade Federal de Pernambuco
Prof. Me. Renan Monteiro do Nascimento – Universidade de Brasília
Prof. Me. Renato Faria da Gama – Instituto Gama – Medicina Personalizada e Integrativa
Profª Ma. Renata Luciane Polsaque Young Blood – UniSecal
Prof. Me. Robson Lucas Soares da Silva – Universidade Federal da Paraíba
Prof. Me. Sebastião André Barbosa Junior – Universidade Federal Rural de Pernambuco
Profª Ma. Silene Ribeiro Miranda Barbosa – Consultoria Brasileira de Ensino, Pesquisa e Extensão
Profª Ma. Solange Aparecida de Souza Monteiro – Instituto Federal de São Paulo
Profª Ma. Taiane Aparecida Ribeiro Nepomoceno – Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Prof. Me. Tallys Newton Fernandes de Matos – Faculdade Regional Jaguaribana
Profª Ma. Thatiany Jasmine Castro Martins de Carvalho – Universidade Federal do Piauí
Prof. Me. Tiago Silvío Dedoné – Colégio ECEL Positivo
Prof. Dr. Welleson Feitosa Gazel – Universidade Paulista

Desenvolvimento e transferência de tecnologia na engenharia química 2

Bibliotecária: Janaina Ramos
Diagramação: Camila Alves de Cremo
Correção: Mariane Aparecida Freitas
Edição de Arte: Luiza Alves Batista
Revisão: Os Autores
Organizador: Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

D451 Desenvolvimento e transferência de tecnologia na engenharia química 2 / Organizador Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua. – Ponta Grossa - PR: Atena, 2021.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-5706-922-6

DOI 10.22533/at.ed.226211904

1. Engenharia química. I. Paniagua, Cleiseano Emanuel da Silva (Organizador). II. Título.

CDD 660

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná – Brasil

Telefone: +55 (42) 3323-5493

www.atenaeditora.com.br

contato@atenaeditora.com.br

DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa.

APRESENTAÇÃO

Este e-book intitulado: “Desenvolvimento e Transferência de Tecnologia na Engenharia Química 2” é composto por dezoito capítulos de livros que foram organizados e divididos em três áreas temáticas: (i) minerais e materiais lignocelulósicos; (ii) aplicações industriais e (iii) aplicação de tecnologias avançadas de tratamento com destaque para os processos oxidativos avançados (POAs).

A primeira temática é constituída por oito trabalhos que apresentam estudos de utilização de resíduos como matéria-prima na produção de materiais cerâmicos e a obtenção de materiais de elevado custo e aplicabilidade a partir de matéria-prima mais abundante e economicamente mais acessível. Além disso, apresenta um trabalho que descreve um procedimento experimental para a escolha mais adequada e viável de uma biomassa de origem vegetal que pode apresentar características de um adsorvente e vir a ser utilizado tanto na forma *in natura* quanto modificada quimicamente, objetivando-se a remoção de compostos inorgânicos e orgânicos em diferentes matrizes aquosas. Neste sentido, trabalhos que investigaram a capacidade de remoção de poluentes utilizando minerais (argila) e biomassas vegetais (ricas em celulose e/ou lignina) apresentaram resultados satisfatórios em relação aos compostos-alvo de interesse, com destaque para a remoção do metal cromo hexavalente (Cr^{6+}) e fósforo e nitrogênio amoniacal que provocam a eutrofização de corpos aquáticos e morte de toda a biota.

O segundo tema está associado à aplicação dos conhecimentos de química e engenharia em diferentes seguimentos: (i) alimentação e (ii) processos industriais. No setor de alimentos é apresentado um trabalho que trata da avaliação microbiológica de biscoitos e empanados processados com filé de carpa Húngara, bastante abundante no estado de Santa Catarina. Já em processos industriais é apresentado um estudo que avalia o melhor dimensionamento de um condensador de amônia que possui grandes aplicações em diferentes seguimentos industriais; um estudo que avalia e compara os reatores CSTR e PFR para a produção de combustível proveniente de fontes renováveis e por fim um estudo de caso que avaliou a utilização de biometano em frotas de ônibus de seis cidades do estado de São Paulo.

A última temática trata da aplicação de diferentes POAs (Fenton e fotocatalise heterogênea tanto com o trióxido de tungstênio dopado com prata ($\text{WO}_3\text{-Ag}$) quanto o dióxido de titânio (TiO_2) para a degradação de diferentes CIEs (fármacos, microplásticos) que vem sendo reportado em trabalhos realizados em todo o mundo. No Brasil a falta de uma legislação mais restritiva associada a falta de fiscalização vem colaborando para a maior detecção e quantificação de diferentes CIEs nos diferentes compartimentos aquáticos afetando a qualidade e a sobrevivência dos diferentes organismos presentes nos inúmeros ecossistemas brasileiros.

Neste sentido, a Atena Editora vem colaborando com pesquisadores de todas as áreas do conhecimento possibilitando a divulgação de seus trabalhos e contribuindo com a disseminação destas informações de forma gratuita e acessível em diferentes plataformas digitais.

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1..... 1

ANÁLISE DA INCORPORAÇÃO DE LAMA ABRASIVA PROVENIENTE DO CORTE DE GRANITO NA PRODUÇÃO DE CERÂMICA VERMELHA

Adriel Martins da Silva
Keina Dalila dos Santos
Luan Regio Pestana
Luís Ramon Silva Ferreira
Façal Gazel

DOI 10.22533/at.ed.2262119041

CAPÍTULO 2..... 13

VULCANIZAÇÃO COM PRODUTOS NATURAIS: UMA ANÁLISE ATRAVÉS DA MODELAGEM MOLECULAR

Helson Moreira da Costa
Valéria Dutra Ramos

DOI 10.22533/at.ed.2262119042

CAPÍTULO 3..... 40

OBTAINING GRAPHENE OXIDE FROM GRAPHITE USING THE HUMMERS METHOD

Dailson José de Queiroz Lima
Samantha Amorim Rebolledo
Everton Fabrício Franceschi
Leonardo Auco Brochetti

DOI 10.22533/at.ed.2262119043

CAPÍTULO 4..... 56

PROCEDIMENTOS ALTERNATIVOS DE ADSORÇÃO NO TRATAMENTO DE EFLUENTES: UMA TRIAGEM EXPERIMENTAL

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua
Bruno Elias dos Santos Costa
Nivia Maria Melo Coelho

DOI 10.22533/at.ed.2262119044

CAPÍTULO 5..... 69

UTILIZAÇÃO DE ARGILA TIPO CAULINITA IN NATURA E TRATADA SUPERFICIALMENTE NA ADSORÇÃO DE CROMO HEXAVALENTE Cr(VI)

Lenice Campos
Robert Orlando Braz Giacomini
João Batista dos Santos Magalhães de Almeida
Pedro Roberto Araújo Santos Filho
Mario Sérgio da Rocha Gomes

DOI 10.22533/at.ed.2262119045

CAPÍTULO 6..... 81

AValiação DA INFLUÊNCIA DE PRÉ-TRATAMENTOS ALCALINOS NA EXTRAÇÃO DA

LIGNINA PRESENTE NA FIBRA DO MESOCARPO DO COCO

Geovanna Miranda Teixeira

Emanuel Souza de Souza

Leila Maria Aguilera Campos

DOI 10.22533/at.ed.2262119046

CAPÍTULO 7..... 95

EL TAMAÑO DE LA PARTÍCULA DE BAMBÚ ANGUSTIFOLIA “BAMBUSOIDEAE” FACTOR DETERMINANTE DEL PORCENTAJE DE CELULOSA EXTRAIDO

Willam Esparza

Luis Chamorro

Wilson Herrera

DOI 10.22533/at.ed.2262119047

CAPÍTULO 8..... 105

OTIMIZAÇÃO DA REMOÇÃO DE FÓSFORO E NITROGÊNIO AMONÍACAL POR LIGNINA

Lenice Campos

Bárbara Leticia Peroni

João Batista dos Santos Magalhães de Almeida

Pedro Roberto Araújo Santos Filho

Mario Sérgio da Rocha Gomes

DOI 10.22533/at.ed.2262119048

CAPÍTULO 9..... 118

HIDRÓLISE ENZIMÁTICA DA PALHA DE CANA-DE-AÇÚCAR: ESTUDO CINÉTICO E MODELAGEM SEMI-MECANÍSTICA

Gustavo Batista

Renata Beraldo Alencar de Souza

Antonio José Gonçalves Cruz

DOI 10.22533/at.ed.2262119049

CAPÍTULO 10..... 126

APLICAÇÃO DE WETLANDS NA CONSTRUÇÃO CIVIL

Camila Daniely Costa

Daylaine Aguiar Santos

Manfredo Frederico Felipe Hoppe

DOI 10.22533/at.ed.22621190410

CAPÍTULO 11..... 141

AVALIAÇÃO MICROBIOLÓGICA DE BISCOITOS E EMPANADOS PROCESSADOS COM E SEM GLÚTEN A PARTIR DE FILÉ DE CARPA HÚNGARA (*CYPRINUS CARPIO*)

Arthur Mateus Schreiber

Alessandro Hermann

DOI 10.22533/at.ed.22621190411

CAPÍTULO 12..... 148

DIMENSIONAMENTO E ANÁLISE DE CONDENSADOR DE AMÔNIA DO TIPO PLACA

EM ESPIRAL

Maria Clara de Carvalho Aguiar
Alex Vazzoler

DOI 10.22533/at.ed.22621190412

CAPÍTULO 13..... 157

ANÁLISE COMPARATIVA DO USO DOS REATORES CSTR E PFR PARA A PRODUÇÃO DE BIODIESEL

Gabriella Santos Soares
Sabrina Rodrigues da Silva

DOI 10.22533/at.ed.22621190413

CAPÍTULO 14..... 171

BIOMETHANE FROM LANDFILL GAS IN URBAN BUS FLEETS: STUDY CASE IN SIX CITIES IN ARC, STATE OF SÃO PAULO, BRAZIL

Mauro Donizeti Berni
Paulo Cesar Manduca
Ivo Leandro Dorileo
Leonardo G. de Vasconcelos

DOI 10.22533/at.ed.22621190414

CAPÍTULO 15..... 180

REAGENTES FENTON: TÉCNICA ANALÍTICA PARA PRÉ-TRATAMENTO DE AMOSTRAS DE ÁGUAS RESIDUAIS CONTAMINADAS POR MICROPLÁSTICOS

Andressa Rossatto
Maurício Zimmer Ferreira Arlindo
Taiana Denardi de Souza
Christiane Saraiva Ogradowski

DOI 10.22533/at.ed.22621190415

CAPÍTULO 16..... 184

UTILIZAÇÃO DE MATERIAS BIOADSORVENTES PARA TRATAMENTO DE ÁGUAS CONTAMINADAS E REDUÇÃO DE RISCOS AMBIENTAIS

José Henrique Hammerschmidt Muhlbeier
Luís Fernando Cusioli
Laiza Bergamasco Beltran
Rosângela Bergamasco

DOI 10.22533/at.ed.22621190416

CAPÍTULO 17..... 194

SÍNTESE E AVALIAÇÃO DE NANOPARTÍCULAS DE WO₃-Ag PARA FOTOCATÁLISE HETEROGÊNEA NA DEGRADAÇÃO DE ACETAMINOFENO

Beatriz Lara Diego dos Reis Fusari
Antonio Carlos Silva Costa Teixeira
Priscila Hasse Palharim

DOI 10.22533/at.ed.22621190417

CAPÍTULO 18.....	207
DEGRADAÇÃO DA AMOXICILINA POR PROCESSO OXIDATIVO AVANÇADO EM REATOR CONTÍNUO COM TiO₂ FIXADO AO LEITO	
Bruno Rampanelli Dahmer	
Sabrina Grando Cordeiro	
Giovana Wanessa Franke Bohn	
Jéssica Adriane Barth	
David Green	
Eduardo Miranda Ethur	
Elisete Maria de Freitas	
Gustavo Reisdorfer	
Lucélia Hoehne	
DOI 10.22533/at.ed.22621190418	
SOBRE O ORGANIZADOR.....	218
ÍNDICE REMISSIVO.....	219

VULCANIZAÇÃO COM PRODUTOS NATURAIS: UMA ANÁLISE ATRAVÉS DA MODELAGEM MOLECULAR

Data de aceite: 01/04/2021

Data de submissão: 12/01/2021

Helson Moreira da Costa

Departamento de Materiais (DEMAT), Instituto Politécnico (IPRJ), Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)
Universidade Estácio de Sá (UNESA)
Nova Friburgo, Rio de Janeiro
<http://lattes.cnpq.br/8141875611393566>

Valéria Dutra Ramos

Universidade Estácio de Sá (UNESA)
Nova Friburgo, Rio de Janeiro
<http://lattes.cnpq.br/8980115502042564>

RESUMO: Nesta investigação, os dados experimentais para a vulcanização da borracha natural (NR) e do copolímero de estireno-butadieno (SBR) com óleos vegetais de amendoim, coco e linhaça, além da cera de abelha, foram validados através da modelagem molecular das principais reações do processo. O método semiempírico AM1 (*Austin Model 1*) permitiu comprovar que a redução da dureza, associada à solubilidade na matriz elastomérica, é o fator que permite que ácidos graxos insaturados de 12 ou mais átomos de carbono ajam como ativadores em associação com o óxido de zinco. Porém, o impedimento estérico torna o ácido lignocérico ($\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{22}\text{COOH}$), presente na cera de abelha, um ativador de baixo desempenho. Para os ácidos graxos insaturados de 18 carbonos, presentes nos óleos de amendoim e linhaça,

as insaturações aumentam a reatividade das espécies geradas na vulcanização. No entanto, tal alteração de natureza produz efeito adverso, pois provavelmente induz reações laterais que comprometem o papel ativador dos óleos.

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem molecular; Vulcanização; Produtos Naturais.

VULCANIZATION WITH NATURAL PRODUCTS: AN ANALYSIS THROUGH OF MOLECULAR MODELING

ABSTRACT: In this investigation, experimental data of natural rubber (NR) and styrene-butadiene copolymer (SBR) rubber vulcanization with vegetable oils, peanut, coconut, and linseed, in addition to beeswax, were validated through the molecular modeling of the main reactions of the process. Semi-empirical method AM1 (*Austin Model 1*) showed that the reduction in hardness, associated with solubility in the elastomeric matrix, is the factor that allows unsaturated fatty acids of 12 or more carbon atoms to act as activators in association with zinc oxide. However, steric impediment makes lignoceric acid ($\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{22}\text{COOH}$), present in beeswax, a low performance activator. For the 18-carbon unsaturated fatty acids present in peanut and linseed oils, unsaturation increases the reactivity of the species generated during vulcanization. However, such a change in nature has an adverse effect, because probably induces side reactions that compromise the activating role of oils.

KEYWORDS: Molecular modeling; Vulcanization; Natural products.

1 | INTRODUÇÃO

A vulcanização de elastômeros ou borrachas pode ser compreendida como um processo de reticulação (formação de ligações cruzadas), onde as macromoléculas individuais presentes no polímero são convertidas em uma rede tridimensional elástica. Em geral, a vulcanização é conduzida através de uma composição que contém agentes de vulcanização (enxofre, óxidos metálicos, compostos bifuncionais ou peróxidos) e, se necessário, aceleradores, ativadores, cargas, retardadores etc. A composição é selecionada para produzir as características desejadas de vulcanização e, desta forma, propriedades de interesse nos vulcanizados são alcançadas – módulo, resistência à tração, resistência à abrasão, entre outras (YANG et al., 2018).

Borrachas com utilização mais comum como, por exemplo, a borracha natural (NR) e o copolímero de estireno-butadieno (SBR), são vulcanizadas através de sistemas onde aceleradores orgânicos e ativadores estão sempre presentes. Os aceleradores são usados para reduzir o tempo do processo da vulcanização na reação do enxofre com os elastômeros; ao passo que, os ativadores são facilitadores da ação dos aceleradores, permitindo maior quantidade de ligações cruzadas. Os ativadores podem ser orgânicos ou inorgânicos, sendo o óxido de zinco (ZnO) o ativador mais utilizado. A combinação de ácido esteárico (ativador orgânico) e óxido de zinco (ativador inorgânico) atualmente é a mais empregada no sistema de ativação (SABOYA, 2014; YANG et al., 2018).

Há algum tempo, nosso grupo de pesquisa tem buscado substituir o ácido esteárico nas composições usuais de NR e SBR por produtos naturais. Diferentes óleos vegetais (óleo de linhaça, óleo de coco e óleo de amendoim), além da cera de abelha (um subproduto da atividade apícola), foram testados e os diversos resultados – parâmetros da vulcanização e cinética, além da análise térmica dos ingredientes da composição e suas interações – foram reportados nos trabalhos de Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*).

Em linhas gerais, os experimentos demonstraram que os óleos vegetais apresentam um papel ativador nas composições elastoméricas, embora com uma ordem de eficiência diferenciada na formação de ligações cruzadas dada por: óleo de amendoim = óleo de linhaça < óleo de coco. A cera de abelha em função da sua composição química bastante complexa e por não se encontrar purificada, pois foi empregada *in natura*, não foi considerada um ativador efetivo (BEZERRA et al., 2013 *a e b*; SABOYA, 2014; da COSTA et al., 2017 *a e b*).

Nas últimas décadas, a química molecular ou a modelagem molecular (MM) surgiu como faceta poderosa que proporcionou um melhor entendimento a nível molecular dos mecanismos de ação das moléculas – movimento molecular, transições de fase, mudanças conformacionais, fenômenos termodinâmicos etc. No entanto, um estudo nesse nível exige necessariamente três etapas: (i) a escolha de um modelo que represente com melhor

aproximação as interações intra e intermoleculares de um sistema; (ii) a realização de cálculos quânticos; e, (iii) a interpretação dos resultados obtidos, validando ou rejeitando o modelo obtido. Essas etapas consideram três variáveis muito importantes: o tamanho do sistema a ser estudado (em termo do número de átomos), a precisão que se deseja nos resultados e o custo operacional (condições de *hardware* e *software* para a realização dos cálculos) (RIBEIRO, 2011).

Os três principais métodos teóricos para cálculos computacionais de propriedades moleculares podem ser classificados em: métodos empíricos (mecânica molecular); métodos semiempíricos (SE); e, cálculos *ab initio* (SCOTTI, 2006; ALBUQUERQUE, 2008).

A mecânica molecular consiste no uso das leis da física clássica e de resultados empíricos para modelagem da estrutura molecular e de propriedades químicas. Portanto, os cálculos de mecânica molecular incorporam apenas de modo indireto as informações eletrônicas dos sistemas químicos, trazendo grandes limitações no alcance teórico de seus resultados (SCOTTI, 2006; ALBUQUERQUE, 2008; LEAL et al., 2010; RIBEIRO, 2011).

Em contrapartida, os métodos semiempíricos são cálculos de orbital molecular (OM), empregando vários graus de aproximação e que usam apenas os elétrons de valência. De modo simplificado, pode-se dizer que os métodos mecânico-quânticos semiempíricos representam uma abordagem à solução das equações de Schrödinger para sistemas com muitos corpos (átomos, moléculas ou sólidos) usando a simulação numérica e computacional. A qualidade dos métodos semiempíricos depende das aproximações teóricas que lhe deram origem e da amplitude e qualidade da informação usada em sua parametrização (SCOTTI, 2006; ALBUQUERQUE, 2008; LEAL et al., 2010; RIBEIRO, 2011).

Por sua vez, os cálculos *ab initio* são cálculos mecânico-quânticos que usam equações exatas, sem aproximações, que envolvem a população eletrônica total da molécula. Os métodos são baseados no uso da equação de Schrödinger completa para tratar todos os elétrons de um sistema químico. Os métodos *ab initio* trazem uma limitação computacional grande, pois o aumento no sistema eletrônico (quantidade de átomos na molécula ou número atômico dos átomos) produz um grande aumento no tempo computacional de cálculo, devido à grande quantidade de integrais que precisam ser resolvidas numericamente. Isto torna este poderoso método limitado para aplicação em sistemas moleculares maiores (enzimas, catalisadores etc.) (SCOTTI, 2006; ALBUQUERQUE, 2008; LEAL et al., 2010).

Uma vez que a modelagem molecular (MM) permite não apenas estimar as propriedades específicas de um composto, mas também auxilia na interpretação de reações químicas, o objetivo desse novo manuscrito é utilizar os recursos computacionais exigidos pela MM para a melhor compreensão teórica e validação dos dados experimentais obtidos nos trabalhos citados de Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*). Consideramos que a abordagem é inovadora, pois não encontramos um paralelo na literatura. Além disso, o óleo de coco mostrou-se um promissor

substituto do ácido esteárico na vulcanização e a MM pode não apenas corroborar tal afirmação, mas também abrir perspectivas para a escolha de outros produtos de origem vegetal úteis ao processo.

Assim sendo, os principais constituintes da composição química dos óleos vegetais e da cera de abelha (ácidos graxos saturados com seis a vinte e quatro átomos de carbono na cadeia; e, ácidos graxos insaturados com dezoito carbonos na cadeia) foram selecionados como reagentes. Duas reações químicas envolvidas na vulcanização foram escolhidas e a modelagem através de um método semiempírico (SE) foi conduzida. O princípio de Pearson foi empregado para a interpretação dos resultados teóricos e um comparativo foi traçado com os resultados dos experimentos realizados por Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*).

2 | METODOLOGIA

2.1 Produtos naturais e análise da vulcanização

O processamento das diferentes composições de NR e SBR com os óleos vegetais e a cera de abelha, assim como os parâmetros característicos da vulcanização (tempo ótimo de cura, t_{90} ; torques máximo e mínimo, S'_h e S'_l , respectivamente; e, tempo de pré-cura, t_{s1}) foram devidamente descritos nos trabalhos de Saboya (2014) e da Costa (2017, *a*). De igual maneira, a caracterização físico-química dos diferentes óleos vegetais e da cera de abelha é pormenorizada em Bezerra et al. (2013, *a e b*) e Campbell (2016). Na Tabela 1 encontra-se a composição química aproximada dos óleos vegetais com os constituintes principais listados.

Produto Natural	Ácidos graxos	Porcentagem (%)
Óleo de amendoim	Ácido palmítico	6 – 16
	Ácido esteárico	1,3 – 6,5
	Ácido oleico	35 – 72
	Ácido linoleico	13 – 45
	Ácido linolênico	< 0,3
Óleo de coco	Ácido láurico	40 – 50
	Ácido mirístico	15 – 20
	Ácido palmítico	9 – 12
	Ácido esteárico	2 – 4
	Ácido oleico	6 – 9
Óleo de linhaça	Ácido palmítico	4 – 7
	Ácido esteárico	2 – 4

Ácido oleico	14 – 30
Ácido linoleico	14 – 25
Ácido linolênico	45 – 60

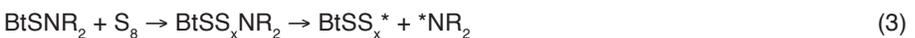
Tabela 1 – Composição química dos óleos vegetais (BEZERRA et al., 2013 a e b; CAMPBELL, 2016)

É importante ressaltar que os principais constituintes dos óleos vegetais são os triacilgliceróis ou triglicerídeos. Os triacilgliceróis podem ser simples, nos quais todos os três grupos acila são os mesmos; ou, mais comumente, mistos onde os grupos acila são diferentes. A hidrólise de uma gordura (triacilgliceróis sólidos à temperatura ambiente) ou óleo (triacilgliceróis líquidos à temperatura ambiente) produz uma mistura de ácidos graxos. Os ácidos graxos contabilizam 95% da massa total dos triacilgliceróis e seu conteúdo é característico de cada óleo (SABOYA, 2014).

Por sua vez, a composição da cera de abelha depende em parte das subespécies de *Apis mellifera*, da idade da cera e das condições climáticas da sua produção. Esta variação ocorre principalmente na quantidade relativa dos diferentes componentes presentes do que propriamente na sua natureza. A mistura inclui hidrocarbonetos, ácidos graxos livres, monoésteres, diésteres, triésteres, hidroximonoésteres, hidroxipoliésteres, monoésteres de ácidos graxos, poliésteres de ácidos graxos e alguns componentes não identificados (CAMPBELL, 2016).

Desta maneira, a modelagem molecular foi conduzida baseando-se:

- I. Nos ácidos graxos presentes na composição química dos óleos vegetais de amendoim, coco e linhaça; e, na cera de abelha. Um conjunto de ácidos graxos saturados de 6 a 24 átomos de C na cadeia foi selecionado, assim como ácidos graxos insaturados de 18 átomos de C na cadeia.
- II. Na escolha de reações químicas específicas presentes nos mecanismos cinéticos da vulcanização por benzosulfenamidas. Tais mecanismos são descritos por Coran (1964, a, b e c; 1965) e Chapman (1978), conforme ilustram as reações (1) e (2) de Coran e as reações (3) a (5) de Chapman.



No esquema reacional de Coran: **A** é o acelerador e/ou seus produtos de reação (com enxofre, Zn^{2+} , etc.); **B** é o precursor de ligações cruzadas, provavelmente de natureza

polimérica na forma de polissulfeto; \mathbf{B}^* é a forma ativa de \mathbf{B} , provavelmente um radical livre na forma de radical tiil; \mathbf{Vu} é a ligação cruzada formada; α e β são ajustes estequiométricos. A borracha não é usada no esquema reacional de Coran, pois é considerada como estando em excesso, com uma concentração que permanece essencialmente constante durante o processo. Por sua vez, no esquema reacional de Chapman: Bt corresponde ao grupamento benzotiazol; enquanto, BtSNR_2 é a molécula do acelerador.

As reações químicas (6) e (7), definidas a partir dos mecanismos descritos, foram consideradas fundamentais na formação de ligações cruzadas e foram selecionadas para a modelagem molecular.



A reação (6) foi interpretada como uma reação de metátese ou “reação de duplo deslocamento”. O deslocamento da base RCOO^- pela base O^{2-} é acompanhada pela extração de H^+ pelo ácido Zn^{2+} . A reação (6) corresponde a reação entre o ácido graxo (coativador) e o óxido de zinco (ativador), o que disponibilizaria no meio reacional, em uma forma solúvel, o cátion Zn^{2+} . O carboxilato de zinco formado em (6) teria, então, a habilidade de reagir com polissulfetos (BtSS_xY , produto originado de fragmentos do acelerador orgânico combinados com moléculas de enxofre, S_8) e formar o complexo sulfurante na reação (7).

Guzmán et al. (2012) afirmam que no curso geral da vulcanização é geralmente aceito, mas ainda não de consenso comum, a natureza das espécies sulfurantes ativas e o mecanismo de sua reação com as macromoléculas de borracha, particularmente se o óxido de zinco é ou não envolvido. Diversos mecanismos têm sido propostos, mas a plena elucidação do mecanismo é ainda difícil por causa da complexidade e da dificuldade de análise dos vulcanizados.

Contudo, Ikeda et al. (2015) parecem ter chegado a uma resposta para tal problema utilizando *in situ* as espectroscopias de infravermelho e estrutura fina de absorção de raios X (XAFS). Os autores investigaram a estrutura dos intermediários gerados a partir da reação entre o óxido de zinco e o ácido esteárico durante a vulcanização da borracha de isopreno. A estrutura dominante é a de um complexo bidentado de zinco/estearato em ponte com razão molar e número de coordenação inesperados de 1:1 e 4, respectivamente.

Tal complexo pode ser visualizado na Figura 1a. Os aceleradores usados nos manuscritos de Bezerra et al. (2013 *a* e *b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a* e *b*) foram o N-ciclohexil-2-benzotiazol-sulfenamida (CBS) e o N-terc-butil-2-benzotiazol-sulfenamida (TBBS). As estruturas dos aceleradores são encontradas na Figura 1b.

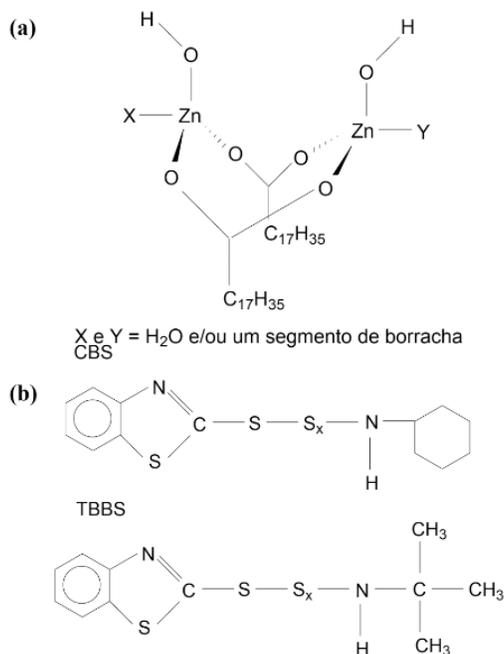


Figura 1 – (a) Estrutura do complexo zinco/estearato proposta por Ikeda et al. (2015); (b) Estrutura dos aceleradores orgânicos CBS e TBBS utilizados

2.2 Procedimento para modelagem molecular

O processo de modelagem molecular foi conduzido através do programa HyperChem 7.0. Os métodos semiempíricos (SE) foram escolhidos em função da complexidade dos sistemas investigados e por permitirem maior velocidade nos cálculos dos parâmetros de interesse. O método AM1 (*Austin Model 1*) foi selecionado, pois é um dos mais usados entre todos os métodos semiempíricos para moléculas orgânicas (HYPERCHEM 7.0, 2002; SCOTTI, 2006; ALBUQUERQUE, 2008).

A rotina experimental adotada neste manuscrito envolveu primeiramente o cálculo da geometria molecular otimizada, ou seja, da estrutura tridimensional da molécula que apresentava a menor energia potencial. Tal etapa é primordial para que as demais propriedades moleculares de interesse possam ser estimadas como, por exemplo, o momento de dipolo elétrico (e); a área superficial (A) e o volume molecular (V); a energia (E) dos orbitais de fronteira (HOMO – orbital molecular ocupado mais alto, e LUMO – orbital molecular não ocupado mais baixo); o mapa de potencial eletrostático (MPE); e, o calor de formação (ΔH_f). Além disso, várias outras propriedades importantes podem ser estimadas, conforme as Equações abaixo (THANIKAIVELAN et al., 2000):

$$\text{Índice de dureza } (\eta): \eta = \frac{1}{2} \cdot (E_{lumo} - E_{homo}) \quad (1)$$

$$\text{Potencial químico } (\mu): \mu = \frac{1}{2} \cdot (E_{lumo} + E_{homo}) \quad (2)$$

$$\text{Índice de maciez (S): } S = \frac{1}{\eta} \quad (3)$$

$$\text{Índice de eletronegatividade } (\chi): \chi = -\mu \quad (4)$$

$$\text{Índice de eletrofilicidade } (\omega): \omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad (5)$$

As condições gerais de modelagem adotadas foram: o método semiempírico AM1; o algoritmo de otimização de Polak-Ribiere (gradiente conjugado) para a minimização de energia com as opções de critério de convergência do gradiente RMS de 0,01 kcal.mol⁻¹ ou um máximo de 5000 ciclos de interações; e, a molécula disposta no vácuo.

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Análise do efeito dos ácidos graxos saturados

Nos trabalhos de Bezerra et al. (2013 *a e b*) e Saboya (2014) foi verificado que as composições químicas dos óleos vegetais de amendoim, coco e linhaça são bastante variadas, embora sejam predominantemente ricas em determinados tipos de ácidos graxos. De igual maneira, a cera de abelha, embora possua complexa composição química, contém de 12% a 15% em ácidos graxos, onde é majoritária a presença do ácido lignocérico.

Uma vez que nos trabalhos supracitados ficou demonstrada uma relação direta entre a composição química dos produtos naturais e a vulcanização da borracha natural (NR) e do copolímero de estireno e butadieno (SBR), inicialmente escolhemos para a modelagem molecular uma ampla faixa de ácidos carboxílicos saturados, todos presentes em maior ou menor quantidade nos produtos naturais empregados – ver Tabela 2.

Número de átomos de C	Ácido	Estrutura
6	Caproico	H ₃ C(CH ₂) ₄ COOH
8	Caprílico	H ₃ C(CH ₂) ₆ COOH
10	Cáprico	H ₃ C(CH ₂) ₈ COOH
12	Láurico	H ₃ C(CH ₂) ₁₀ COOH
14	Mirístico	H ₃ C(CH ₂) ₁₂ COOH
16	Palmítico	H ₃ C(CH ₂) ₁₄ COOH
18	Esteárico	H ₃ C(CH ₂) ₁₆ COOH
20	Araquídico	H ₃ C(CH ₂) ₁₈ COOH
22	Behênico	H ₃ C(CH ₂) ₂₀ COOH
24	Lignocérico	H ₃ C(CH ₂) ₂₂ COOH

Tabela 2 – Ácidos graxos saturados selecionados para os estudos das reações (6) e (7)

Uma vez que temos ácidos carboxílicos cujas cadeias carbônicas variam de 6 até 24 átomos, a primeira questão a ser considerada é: Qual o comprimento ideal da cadeia carbônica do ácido carboxílico capaz de proporcionar uma ação ativadora efetiva na vulcanização?

De acordo com a literatura, a combinação do óxido de zinco (ZnO) com um ácido graxo (ácidos carboxílicos alifáticos, tais como o ácido esteárico, o ácido palmítico ou ácido láurico) ou a utilização de sais de zinco destes ácidos tem um grande efeito no desenvolvimento da reação de vulcanização, aumentando a sua cinética. O efeito do ácido graxo aumenta com o número de átomos de carbono na sua cadeia carbônica. Particularmente, as características hidrofóbicas e hidrofílicas da molécula de ácido esteárico conferem-lhe uma maior solubilidade nas borrachas e conferem-lhe uma maior eficácia na ativação da vulcanização (CTB, 2020).

Carey (2011) considera o comportamento de solubilidade dos sais de ácidos carboxílicos que têm de 12 a 18 carbonos incomum. Os grupos carboxilato são hidrofílicos (“gostam de água”) e tendem a conferir solubilidade em água às espécies que os contêm. As cadeias longas de hidrocarboneto são lipofílicas (“gostam de gordura”) e tendem a associar-se a outras cadeias de hidrocarboneto. Quando o estearato de sódio é colocado na água, o grupo carboxilato hidrofílico favorece a formação de uma solução; a cadeia alquila lipofílica não favorece isso. A conciliação alcançada é a formação de uma dispersão coloidal de agregados chamados de micelas. As micelas formam-se espontaneamente quando a concentração de carboxilato excede determinado valor mínimo chamado de concentração micelar crítica. Cada micela é composta por 50 a 100 moléculas individuais, com os grupos carboxilato polares voltados para o exterior, onde experimentam forças de atração com a água e os íons sódio. As cadeias de hidrocarboneto apolares são orientadas para o interior da micela, onde forças dipolo induzido-dipolo induzido individualmente fracas, mas cumulativamente significativas, as mantêm juntas. As micelas são aproximadamente esféricas, porque uma esfera apresenta a superfície mínima para determinado volume de material e causa a menor desorganização à estrutura da água.

Assim, pelo exposto nos parágrafos anteriores, uma resposta preliminar seria que há necessidade de uma combinação satisfatória entre a solubilidade na matriz elastomérica e reatividade. Tal premissa parece ser encontrada somente quando a cadeia carbônica possui 12 ou mais átomos de C, ou seja, ácidos graxos do ácido láurico em diante. A fim de corroborar com tal conclusão, as moléculas dos diferentes ácidos graxos foram modeladas e na Figura 2 encontram-se condensadas as informações obtidas. É observado que há uma relação linear entre o aumento gradativo da cadeia carbônica e o aumento verificado na área, volume e polarizabilidade da molécula. Por sua vez, a eletrofilicidade apresenta valores decrescentes com o aumento da massa molar dos ácidos graxos, embora uma correlação linear não possa ser sugerida.

Na Figura 2 também podem ser visualizados os índices de dureza e maciez dos

ácidos graxos. Os índices foram estimados a partir do cálculo dos valores de energia para os orbitais moleculares HOMO e LUMO, ou seja, a energia dos orbitais de fronteira. Os elétrons do HOMO são de maior energia (e menos estabilizados) na molécula. Estes são geralmente os mais energeticamente acessíveis para reações com orbitais não ocupados de outros reagentes. Os orbitais HOMO podem doar elétrons; e, os orbitais LUMO podem aceitar elétrons nas reações (MIESSLER et. al., 2014). Através da Figura 2, é constatado que o aumento da cadeia carbônica dos ácidos graxos produz uma diminuição do índice de dureza (η) ou, em outras palavras, ácidos graxos de maior massa molar apresentam moléculas com maior índice de maciez (S).

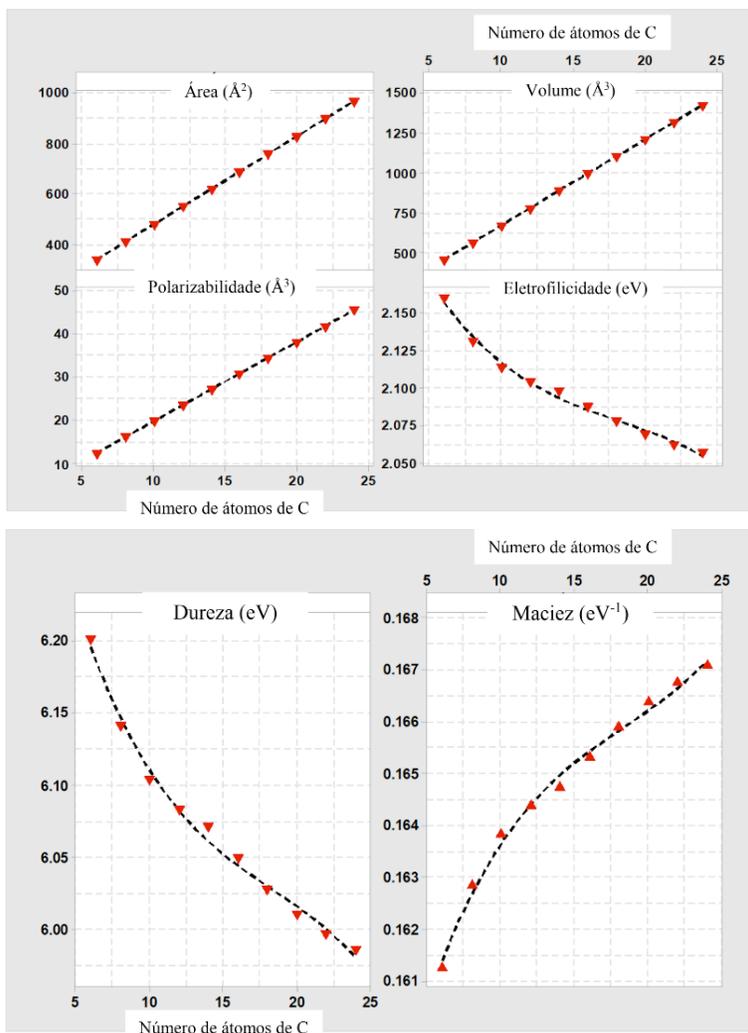


Figura 2 – Variações das propriedades das moléculas dos ácidos graxos (RCOOH), presentes nos óleos vegetais e cera de abelha, de acordo com o tamanho da cadeia carbônica

Segundo Pearson: “Os ácidos duros preferem ligar-se a bases duras e os ácidos moles preferem ligar-se a bases moles”. As interações entre duas espécies moles ou duas duras são mais fortes do que aquelas entre uma espécie dura e uma mole (princípio HSAB). Tal estabilização é *adicional* a outros fatores que contribuem para a força de ligações entre doador e receptor. Esses fatores incluem o tamanho do cátion e do átomo doador; suas cargas; suas eletronegatividades; a sobreposição orbital entre eles; e, a formação do complexo com a substituição do ligante. Uma perspectiva simplista considera as interações duro-duro como principalmente eletrostáticas (com uma alta contribuição iônica), com o LUMO do ácido muito acima do HOMO da base e mudança relativamente pequena nas energias dos orbitais na formação do aduto. Por sua vez, uma interação mole-mole envolve energias HOMO e LUMO que são muito mais próximas e provoca uma grande mudança nas energias dos orbitais durante a formação do aduto (HOUSECROFT e SHARPE, 2013; MIESSLER et. al., 2014).

A fim de que o princípio HSAB pudesse ser aplicado na interpretação do equilíbrio químico da reação (6), as espécies químicas ZnO, H₂O e os diferentes carboxilatos de zinco foram também modeladas. A estrutura idealizada para o óxido de zinco é vista na Figura 3 e os cálculos dos índices de dureza e maciez indicaram $\eta = 5,01 \text{ eV}$ e $S = 0,20 \text{ eV}^{-1}$, respectivamente. Os índices encontrados para os diferentes carboxilatos de zinco são representados na Figura 4. Para a água, os valores encontrados foram $\eta = 8,44 \text{ eV}$ e $S = 0,12 \text{ eV}^{-1}$.

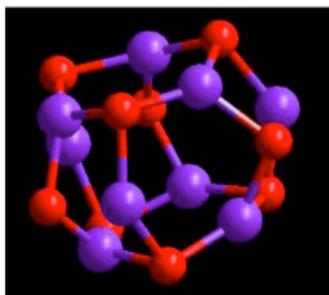


Figura 3 – Estrutura proposta para o ZnO, um prisma hexagonal. Esferas em vermelho correspondem aos átomos de O e as esferas em roxo correspondem aos átomos de Zn

Assim sendo, encontramos no princípio HSAB argumentos qualitativos que corroboram as impressões iniciais sobre os ácidos graxos que podem ser efetivos na vulcanização. No sentido direto do equilíbrio químico da reação (6), o ácido graxo reagente deve apresentar uma dureza o mais próxima possível do óxido de zinco. Pelo gráfico da Figura 2, observa-se que somente a partir do ácido láurico (12 átomos de C) é que o índice η mostra-se inferior a 6,1. Em contrapartida, no sentido inverso do equilíbrio químico da

reação (6), os carboxilatos de zinco devem apresentar dureza comparável com a água. Pelos cálculos efetuados, isso implica em um índice η próximo a 8,44 eV. Na Figura 4 pode ser constatado que tal condição é mais apropriadamente obedecida quando os carboxilatos são formados a partir de ácidos graxos com um número de átomos de C igual ou abaixo de 10 átomos ($\eta > 5,30$ eV e $S < 0,188$ eV).

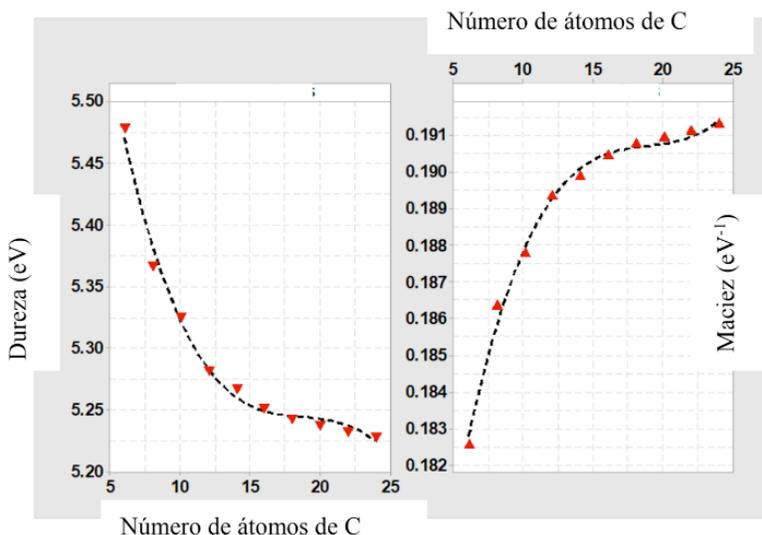


Figura 4 – Variação dos índices de dureza e maciez para os diferentes carboxilatos de zinco, $Zn(RCOO)_2$

Portanto, parece ficar nítida, mais uma vez, a necessidade de os ácidos graxos possuírem cadeias carbônicas iguais ou superiores à doze átomos de C. Uma condição que permite reatividade suficiente com o ZnO e uma constante de equilíbrio que tende a favorecer aos produtos. Em outras palavras, quando $C \geq 12$ átomos a solubilidade na matriz elastomérica em conjunto com a reatividade são alcançados. Por sua vez, quando a cadeia carbônica possui 10 ou menos átomos de C, a reação (6) tem baixa reatividade e o equilíbrio químico no sentido inverso é favorecido.

Estendendo a discussão do princípio HSAB para a reação (7), os carboxilatos de zinco gerados na reação (6) precisam ter reatividade para interagir com os polissulfetos orgânicos. Na Figura 5 são apresentados os valores de dureza para os diferentes polissulfetos que podem ser obtidos quando os aceleradores CBS ou TBBS são usados na vulcanização. Os aceleradores foram empregados nos trabalhos de Bezerra et al. (2013 a e b), Saboya (2014) e Campbell (2016). Quando $x = 0$, não há a formação do polissulfeto e a espécie química corresponde à própria molécula do acelerador.

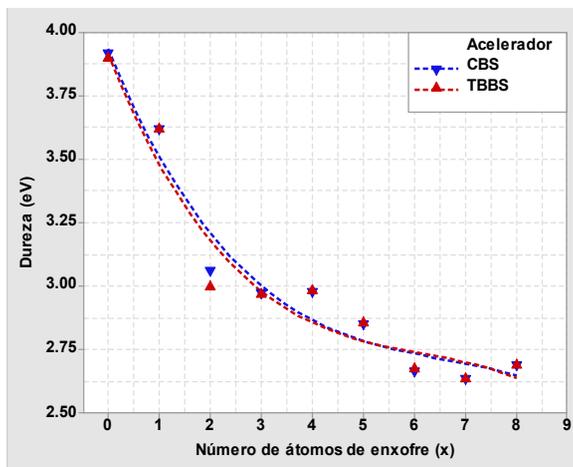


Figura 5 – Dureza dos polissulfetos $BtSS_xY$, formados a partir dos aceleradores orgânicos CBS e TBBS, de acordo com o número x de átomos de enxofre presentes

Nos trabalhos investigados, um sistema de vulcanização convencional (CV) foi escolhido, o que implica em uma relação quantitativa entre as concentrações de enxofre e acelerador superior a 1, ou seja, $[S_8]/[Acelerador] > 1$. Em tal sistema, o elastômero possui ao final da vulcanização uma rede de ligações cruzadas com um percentual aproximado de 95% de ligações de natureza polissulfídica ($3 \leq x \leq 6$) e dissulfídica ($x = 2$), o que proporciona elevada resistência à fadiga e resistência ao rasgo, por exemplo. Todavia, os vulcanizados irão dispor de baixa resistência à reversão e baixa resistência ao envelhecimento pelo calor (GHOSH et al., 2003).

Interpretando os dados da Figura 5 em conjunto com os da Figura 4, chega-se às seguintes conclusões:

- Os polissulfetos orgânicos, gerados a partir de fragmentos dos aceleradores CBS ou TBBS em combinação com o enxofre, são similares quanto à dureza para a faixa de valores de x ;
- As espécies polissulfídicas com $x \geq 6$ parecem atingir valores de dureza constantes na faixa de 2,66 a 2,68;
- A partir do laurato de zinco, $Zn(H_3C(CH_2)_{10}COO)_2$, os carboxilatos seguintes (número de átomos de C > 12) apresentam índices h progressivamente mais próximos àqueles que proporcionam reações efetivas com as espécies polissulfídicas.

Consequentemente, os resultados experimentais encontrados por Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*) podem agora ser embasados. Entre os óleos vegetais testados, as investigações apontaram o óleo de coco como o de melhor desempenho no papel de ativador, pois permitiu alcançar os

maiores valores para o torque máximo (S'_h). Em outras palavras, ele produziu vulcanizados com maior número de ligações cruzadas polissulfídicas, ainda que o rendimento final tenha sido inferior ao da formulação tradicional com ácido esteárico. A razão sugerida para tal desempenho residiu na composição química rica em ácido láurico, cuja quantidade varia entre 44% e 52%. Outros ácidos graxos saturados estão presentes, porém em quantidades menores: ácido caprílico, 5% a 9%; ácido cáprico, 6% a 10%; ácido mirístico, 13% a 19%; ácido palmítico, 8% a 11%; ácido esteárico, 1% a 3%; e outros em quantidades inferiores ou traços. Assim, o óleo de coco apresenta os requisitos, em termos de composição química, que o tornam útil como ativador.

Com relação aos outros óleos vegetais, o óleo de linhaça apresenta em sua composição química ácidos graxos saturados que variam de 6% a 11% e uma presença majoritária dos ácidos graxos insaturados - oleico (ômega 9), 13% a 29%; linoleico (ômega 6), 17% a 30%; e linolênico (ômega 3), 47% a 55% - o que faz do óleo de linhaça um dos mais ricos em ácidos graxos essenciais. Ao mesmo tempo, o óleo de amendoim dispõe em sua composição química de uma concentração em torno de 36% a 67% em ácido oleico e 14% a 43% em ácido linoleico. Assim, a não ocorrência de ácidos graxos saturados em quantidades significativas é apontada como a causa da diminuição da eficiência dos óleos de linhaça e amendoim como ativadores. O efeito dos ácidos graxos insaturados será discutido na seção 3.2.

Ainda que o princípio HSAB tenha ajudado a elucidar o porquê de o óleo de coco ser melhor como ativador do que os óleos de linhaça e amendoim, ainda há um questionamento que necessita de resposta. A cera de abelha possui 11% a 15% da composição química rica em ácidos graxos, onde se destaca a presença em ácido lignocérico. Por que a cera de abelha teve o pior desempenho como ativador entre os produtos naturais testados?

A explicação inicial de Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*) residiu na contaminação da cera de abelha por outras substâncias orgânicas diversas e a baixa concentração de ácidos graxos presentes (12% a 15%) na composição química. Buscando dar maior suporte à resposta para o baixo desempenho da cera de abelha, modelos tridimensionais dos complexos sulfurantes ativos foram propostos tomando-se por base a estrutura sugerida por Ikeda et al. (2015). Os modelos foram construídos a partir de fragmentos do acelerador CBS e dos ácidos láurico, esteárico e lignocérico. As estruturas dos complexos podem ser visualizadas na Figura 6.

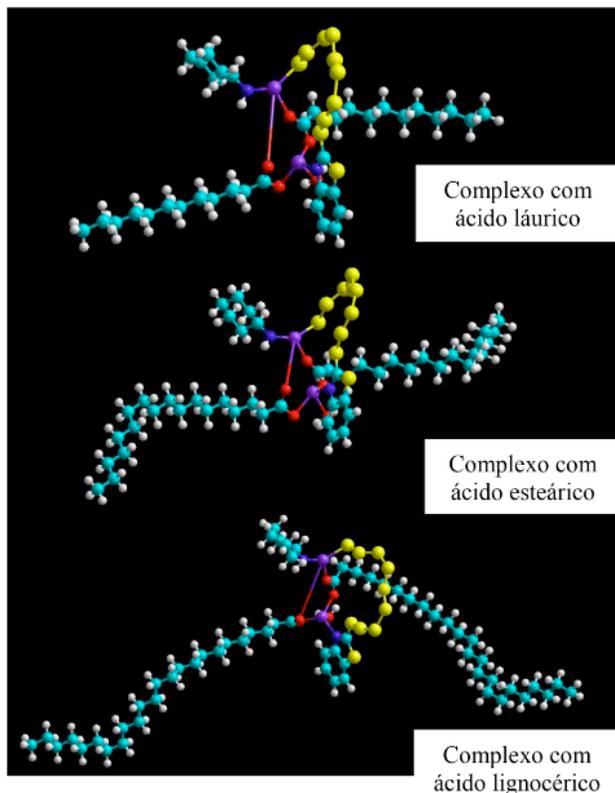


Figura 6 – Estruturas dos complexos ativos sulfurantes formados com oito átomos de enxofre e fragmentos do acelerador CBS e dos ácidos láurico, esteárico e lignocérico.

Legenda: esferas azuis = átomos de C; esferas brancas = átomos de H; esferas vermelhas = átomos de O; esferas amarelas = átomos de S; e esferas violetas = átomos de Zn

A partir da Figura 6 observa-se que a geometria adotada pelos complexos para a minimização da repulsão entre os elétrons dos diferentes pares ligantes e não-ligantes é similar independente do ácido graxo considerado. Em todos os casos, as cadeias carbônicas são dispostas em lados opostos do plano central e o arranjo tridimensional permite, então, que os átomos de enxofre fiquem suficientemente “livres” para a interação com as cadeias elastoméricas. Porém, os complexos sulfurantes devem se difundir entre as cadeias do elastômero para a formação das ligações cruzadas e, desta maneira, quanto maior o impedimento estérico encontrado, menor será a velocidade da reação de reticulação. Conseqüentemente, o complexo sulfurante a partir do ácido lignocérico deverá encontrar considerável dificuldade de se aproximar e interagir com as cadeias elastoméricas diante do seu tamanho. De acordo com os cálculos da modelagem molecular, o complexo do ácido lignocérico da Figura 6 apresenta um volume aproximado de 3976 \AA^3 ao passo que o complexo do ácido esteárico é 16% menor com cerca de 3340 \AA^3 .

Os índices de dureza (η) foram calculados para os complexos ativos sulfurantes formados com fragmentos de CBS e para aqueles gerados com fragmentos de TBBS. Na Figura 7, os valores de η são apresentados. Os complexos sulfurantes com CBS não apresentaram variação significativa de η com o aumento da cadeia carbônica do ácido graxo. Um valor aproximadamente constante em torno de 2,50 foi encontrado. Portanto, o ponto chave parece não residir em reatividade ou equilíbrio químico, mas sim na cinética reacional. O impedimento estérico do complexo sulfurante do ácido lignocérico limita a interação com eficiência junto as cadeias elastoméricas e, desta maneira, não proporciona uma rede com ligações cruzadas em quantidades expressivas como àquelas geradas quando os ácidos láurico e esteárico estão presentes. Logo, além das impurezas e da baixa quantidade de ácidos graxos presentes na cera de abelha, o ácido majoritário da composição química, ácido lignocérico, não oferece uma velocidade reacional satisfatória para a vulcanização.

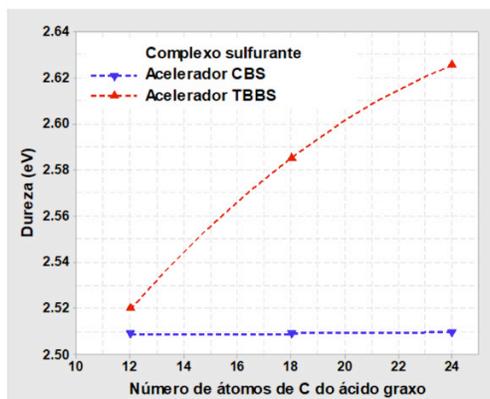


Figura 7 – Dureza dos complexos sulfurantes ativos formados a partir de oito átomos de enxofre, fragmentos do acelerador CBS ou TBBS e com o ácido graxo láurico, esteárico ou lignocérico

No que diz respeito aos complexos sulfurantes formados com fragmentos de TBBS, um aumento de natureza não linear foi encontrado nos valores de dureza com o aumento da cadeia carbônica do ácido graxo. Assim, o ácido lignocérico em sistemas de vulcanização com o acelerador TBBS é novamente desfavorecido. Do ponto de vista cinético, o impedimento estérico não irá proporcionar uma velocidade satisfatória de reação de formação das ligações cruzadas entre as cadeias elastoméricas. Do ponto de vista da reatividade química, o aumento de dureza significa um aumento da diferença de energia entre os orbitais HOMO e LUMO dos complexos, o que pode representar um acréscimo de energia de ativação na reação com as cadeias de borracha.

Em da Costa et al. (2017 a) encontramos os resultados experimentais que suportam

as hipóteses acima. Os dados do tempo de pré-cura (t_{s1}) e do tempo ótimo de cura (t_{90}) em vulcanizados de SBR a 150°C foram superiores aos das demais composições contendo ácido esteárico ou óleos vegetais; enquanto, o torque máximo (S'_n), o que dá uma ideia da densidade de ligações cruzadas, só alcançou valor ligeiramente superior ao da composição com óleo de amendoim. Dessa forma, se em um primeiro momento o equilíbrio químico das reações (6) e (7) surge como favorável ao ácido lignocérico presente na cera de abelha, a velocidade reacional de reticulação acaba por não ser satisfatória em função da estrutura química do complexo sulfurante gerado.

Uma citação bibliográfica que reforça os argumentos discutidos é encontrada em Junkong et al. (2020), os quais estudaram o efeito de ácidos graxos com diferentes comprimentos de cadeia alifáticos durante a vulcanização da borracha de isopreno. Utilizando técnicas espectroscópicas *in situ*, os autores reportam que a estrutura do complexo sulfurante formado durante a vulcanização foi essencialmente o mesmo, independente do ácido graxo. Porém, a reatividade do ácido araquídico ($\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{18}\text{COOH}$) foi considerada baixa sendo encontrado prolongados tempos de pré-cura e de cura, ou seja, uma lenta taxa reacional para a vulcanização. Ocorrência atribuída ao elevado impedimento estérico do complexo sulfurante no curso das reações de vulcanização.

3.2 Análise do efeito dos ácidos graxos insaturados

Os óleos vegetais de amendoim e linhaça apresentaram um desempenho, como ativadores do processo de vulcanização, inferior ao do óleo de coco, segundo os trabalhos de Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*). A composição química dos óleos de amendoim e linhaça apresenta um percentual majoritário de ácidos graxos insaturados com 18 carbonos – ácido oleico (ácido *cis*-9-octadecenoico), ácido linoleico (ácido *cis,cis*-9,12-octadecadienoico) e ácido linolênico (ácido *cis, cis, cis*-9,12,15-octadecatrienoico). Assim, o questionamento é por que tais ácidos graxos insaturados se comportaram de maneira diferente do ácido esteárico (ácido octadecanoico)?

As moléculas dos ácidos graxos foram modeladas e alguns parâmetros de interesse são mostrados na Figura 8. Na Figura 9 são apresentadas as estruturas tridimensionais das moléculas com o respectivo mapa de potencial eletrostático (MPE).

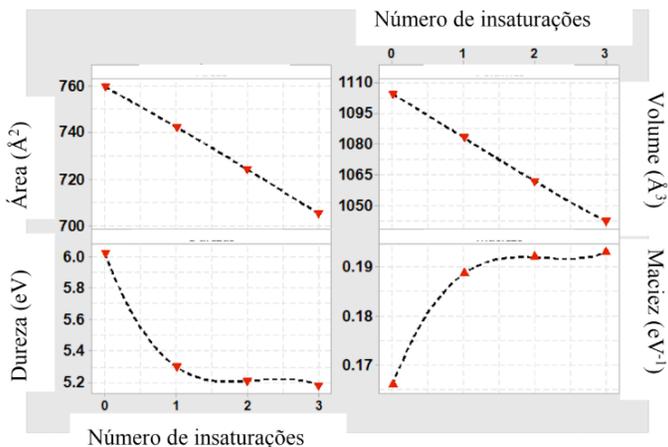


Figura 8 – Variação da área, volume, dureza e maciez dos ácidos graxos com 18 carbonos de acordo com o número de insaturações na cadeia

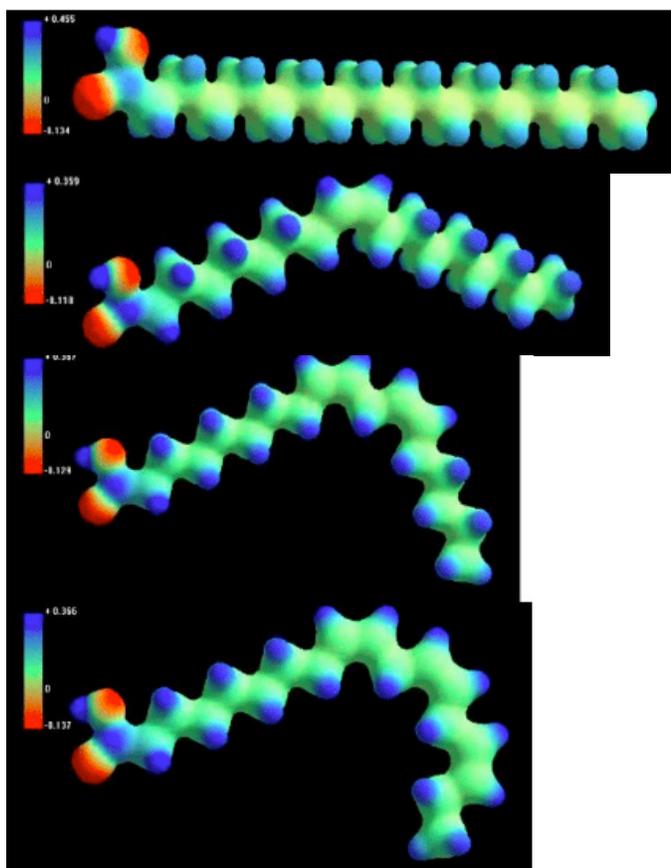


Figura 9 – Mapa de potencial eletrostático (MPE) das moléculas de ácido graxo com 18 átomos de carbono. De cima para baixo: ácido esteárico, ácido oleico, ácido linoleico e ácido linolênico.

Legenda: regiões mais positivas em azul e regiões mais negativas em vermelho

Observa-se uma redução da área e do volume da molécula com o aumento do número de insaturações na cadeia carbônica. Tal comportamento é de natureza essencialmente linear e pode ser melhor entendido através da Figura 9. Uma ligação dupla é mais forte (728 kJ/mol) e menor (1,33 Å) que uma ligação simples (377 kJ/mol e 1,54 Å). Além disso, os dois orbitais *p* que se sobrepõem para formar a ligação *p* precisam estar o mais paralelos possível um ao outro para a sobreposição ocorrer (SOLOMONS e FRYHLE, 2001). Isso significa que os átomos ficam no mesmo plano e os elétrons no orbital *p* ocupam um volume do espaço acima e abaixo do plano. Portanto, a rotação livre da ligação dupla é impedida, enquanto a configuração *cis* adotada nos ácidos graxos insaturados gera o “dobramento” da molécula, o que explica a diminuição de área e volume.

A presença de insaturações diminuiu de forma acentuada a dureza (*h*) ou, em outras palavras, aumentou consideravelmente a maciez (*S*) dos ácidos graxos, conforme se verifica na Figura 8. O valor de *n* pareceu se estabilizar em torno de 5,2 quando o ácido linolênico foi alcançado. Em princípio, isto representa na reação (6) um reagente com maior reatividade em relação ao ZnO e, portanto, um deslocamento favorável ao equilíbrio químico no sentido dos produtos, ou seja, dos respectivos carboxilatos. As insaturações também provocaram uma mudança no perfil do MPE das moléculas, conforme ilustra a Figura 9. No ácido esteárico, as regiões negativas e positivas concentram-se na extremidade da molécula onde se encontra o grupamento COOH, enquanto o restante da cadeia carbônica é essencialmente neutro. Em contrapartida, as insaturações geram novas áreas de acúmulo de carga negativa, o que pode ser verificado, indiretamente, pelo surgimento da coloração azul escura no MEP junto aos átomos de H distribuídos ao longo da cadeia carbônica.

Além da diminuição da dureza e aumento da reatividade dos ácidos graxos, a influência das insaturações presentes afetou a vulcanização dos elastômeros de outras maneiras. De acordo com Solomons e Fryhle (2001), os ácidos graxos insaturados não podem formar facilmente uma estrutura ordenada e, então, têm pontos de fusão menores do que os ácidos graxos saturados com o mesmo número de carbonos. Assim, os óleos de amendoim e linhaça são líquidos em temperatura ambiente, enquanto o ácido esteárico é sólido (PF \cong 70°C). O óleo de coco, em função do alto teor de ácido láurico e outros ácidos graxos insaturados, tende a se mostrar pastoso ou sólido em temperaturas inferiores a 25°C. Em Saboya (2014) é apontado que o estado físico dos óleos facilitou a solubilização e a mistura dos ingredientes da composição, o que se refletiu em valores mais elevados de torque mínimo (S'_i) e menores valores do tempo de pré-cura ($t_{s,i}$), ou seja, o início da reação de vulcanização ocorreu com maior rapidez nas composições de NR com os óleos vegetais, particularmente o óleo de amendoim. Consequentemente, conciliando os dados experimentais de Saboya (2014) aos determinados mediante a modelagem molecular, é corroborada a hipótese da maior reatividade dos óleos vegetais insaturados como ativadores.

Prosseguindo a análise através da modelagem molecular, na Figura 10 são apresentados os dados de dureza e maciez dos carboxilatos de zinco gerados a partir de

cadeias carbônicas com 18 átomos. Mais uma vez, o comportamento encontrando reforça as observações já feitas durante a análise da Figura 8. Os carboxilatos têm a dureza diminuída ou a maciez aumentada de forma acentuada com a introdução das insaturações, o que, pela Figura 5, implicaria em espécies de maior reatividade com os polissulfetos $BtSS_x$. Portanto, a reação (7) seria mais favorecida na geração dos complexos sulfurantes quando os óleos de amendoim e linhaça fossem usados no lugar do ácido esteárico.

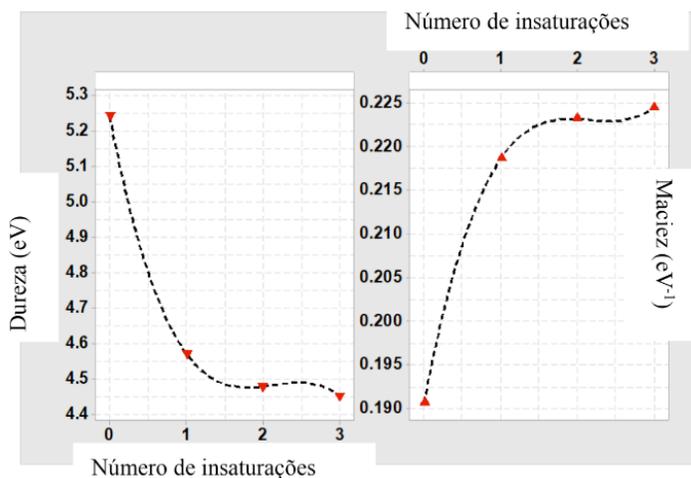


Figura 10 – O efeito das insaturações sobre a dureza e a maciez dos carboxilatos de zinco gerados a partir de ácidos graxos com 18 carbonos

Contrariamente ao esperado, em trabalhos de Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*), os experimentos demonstraram que os óleos de amendoim e linhaça tiveram um papel ativador nas composições elastoméricas, porém com uma eficiência de formação de ligações cruzadas inferior inclusive ao óleo de coco. Então, a questão final a ser abordada é: O que ocasiona o baixo desempenho desses óleos vegetais insaturados?

Um fator que explica o observado é a tendência que os compostos com ligações duplas $C=C$ têm de sofrerem reações de adição. Duas características da ligação dupla ajudam a compreender por que tais reações de adição ocorrem: (a) Uma reação de adição é o resultado da conversão de uma ligação π e uma ligação σ em duas ligações σ . Normalmente, o resultado dessa troca é favorável energeticamente; (b) Os elétrons da ligação π estão expostos. Como a ligação π resulta da sobreposição de orbitais p , os elétrons π se localizam acima e abaixo do plano da ligação dupla. A ligação π é particularmente suscetível a reagentes ávidos por elétrons (reagentes eletrofílicos – reagentes positivos como os prótons, reagentes neutros e os ácidos de Lewis) (SOLOMONS e FRYHLE, 2001). Logo, as insaturações permitem a maior reatividade dos ácidos graxos nas reações de

vulcanização, mas propiciam toda uma gama de possíveis reações laterais. Por conseguinte, o balanço final é um ativador de menor desempenho.

Na Figura 11 são apresentados dos dados de dureza (η) e maciez (S) dos complexos sulfurantes propostos por Ikeda et al. (2015) adaptados para os aceleradores CBS e TBBS e os ácidos graxos de 18 carbonos. O efeito das insaturações é novamente determinante na redução da dureza dos complexos, particularmente, quando se observa os complexos gerados a partir de fragmentos do acelerador TBBS – um decréscimo já pronunciado de η com a inclusão de apenas uma insaturação na cadeia carbônica é claramente visível.

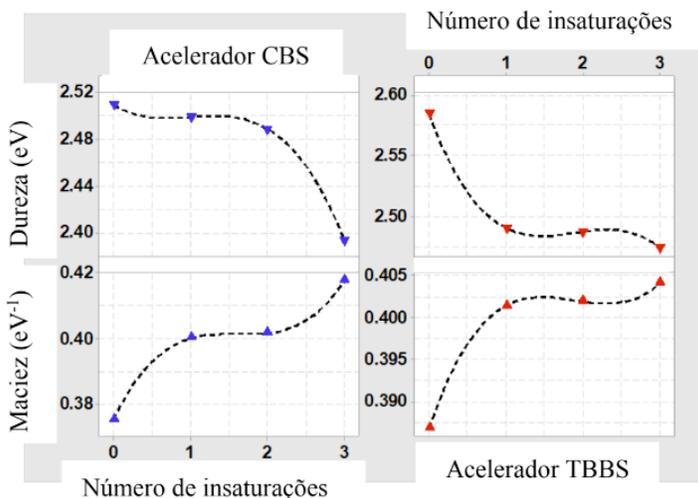


Figura 11 – Efeito das insaturações sobre a dureza e a maciez dos complexos sulfurantes ativos formados a partir de oito átomos de enxofre, fragmentos do acelerador CBS ou TBBS e os ácidos graxos com 18 carbonos

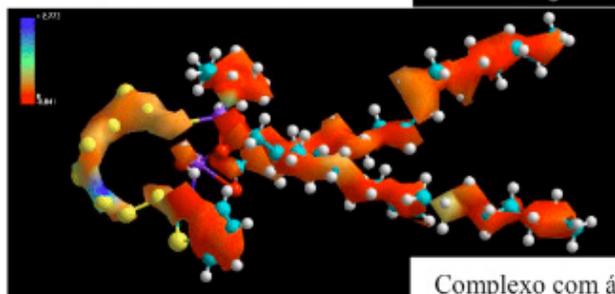
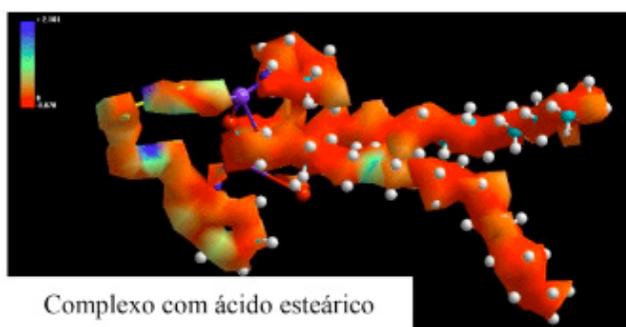
Mais uma vez, a questão recai sobre uma reatividade acentuada dos complexos sulfurantes com a presença de diferentes sítios para ataques eletrofílicos, o que, conseqüentemente, permite reações laterais e diminui a eficiência na formação de ligações cruzadas entre as cadeias elastoméricas. Em Saboya (2014), por exemplo, encontramos respaldo para tais considerações. A borracha natural vulcanizada pelo sistema convencional em 160°C apresentou tempo ótimo de cura (t_{90}) entre 9 e 10 minutos, enquanto o torque máximo alcançado (S'_h) foi de aproximadamente 66 dN.m. Quando os óleos de linhaça e amendoim substituíram o ácido esteárico, os valores de t_{90} ficaram entre 6 e 7 minutos, porém S'_h foi reduzido para 57 dN.m e 58 dN.m, respectivamente.

A Figura 12 corresponde ao mapa de potencial eletrostático (MPE) dos diferentes complexos sulfurantes formados com os ácidos graxos esteárico, oleico, linoleico ou linolênico, fragmentos do acelerador CBS e oito átomos de enxofre. É nítida pela codificação de cores

como as insaturações mudam a distribuição de cargas ao longo do complexo. No complexo sulfurante formado pela molécula do ácido esteárico há uma faixa +2,10 (azul) até -0,07 (vermelho) para as regiões carregadas positiva e negativamente, respectivamente. As regiões em tons laranja e vermelho se distribuem por toda a estrutura do complexo, particularmente pela área onde se encontram os átomos de enxofre alinhados (extremo esquerdo).

Em contrapartida, no complexo sulfurante formado pela molécula do ácido linolênico, as três insaturações presentes na cadeia do ácido graxo não apenas “dobram” o complexo em um formato mais compacto, mas também concentram as regiões de carga negativa essencialmente no extremo direito, ou seja, sobre a cadeia carbônica. Além disso, há também um decréscimo na faixa de distribuição de cargas, a qual varia de +0,72 até -0,01. Outra vez, a modelagem molecular fornece os indícios que corroboram os dados experimentais e as suposições dos trabalhos de Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*).

Um argumento final para demonstrar a possibilidade de reações laterais em complexos sulfurantes ativos formados pelas moléculas dos ácidos graxos insaturados apoia-se no manuscrito de Pereira et al. (2016). Os autores do manuscrito descrevem que o HOMO ou o LUMO podem não ser parâmetros determinantes no curso de reações químicas, mas sim o próximo orbital ou qualquer orbital que tenha energia muito próxima do HOMO ou do LUMO, ou seja, é importante investigar o papel do orbital molecular de fronteira efetivo para a reação (FERMO). Assim, investigamos a disposição dos orbitais HOMO com energias próximas e na Figura 13 estes são apresentados para dois complexos sulfurantes ativos.



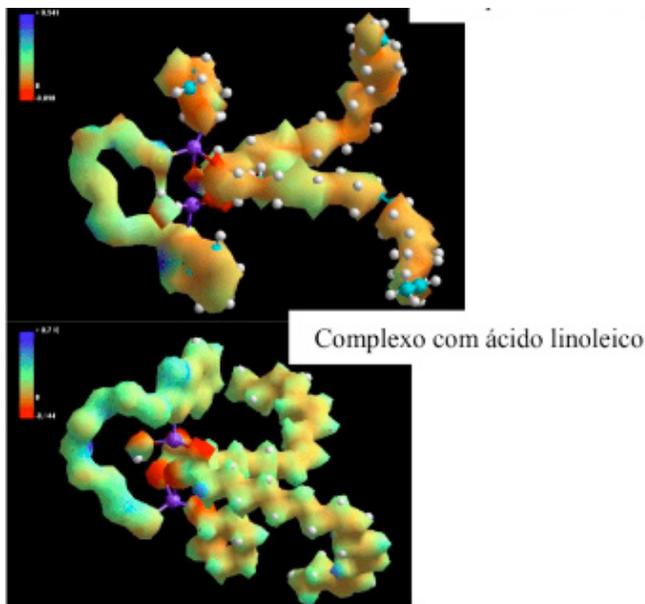


Figura 12 – Mapa de potencial eletrostático (MPE) dos complexos sulfurantes ativos formados pelas moléculas de ácidos graxos com 18 carbonos, fragmentos do acelerador CBS e oito átomos de enxofre. Legenda: regiões mais positivas em azul e regiões mais negativas em vermelho

Os orbitais HOMO 0 e HOMO +4 do complexo sulfurante ativo com ácido esteárico estão dispostos sobre os átomos de enxofre. Para o orbital HOMO 0, o valor de energia calculado foi de -8,14 eV; enquanto para o orbital HOMO +4 a energia foi de -9,29 eV. Portanto, uma diferença de 1,15 eV. No complexo sulfurante ativo do ácido linolênico, o orbital HOMO +4 é deslocado para as insaturações presentes na cadeia carbônica e as energias calculadas foram: HOMO 0, -7,99 eV; e, HOMO +4, -9,30 eV. Uma diferença energética de 1,31 eV. Assim, ainda que o incremento de energia para se alcançar o orbital de fronteira HOMO 0 seja maior, as ligações duplas C=C proporcionam novos sítios reacionais e, conseqüentemente, oportunidades de ocorrência de reações laterais. Os orbitais HOMO 0 e HOMO +4 do complexo sulfurante ativo com ácido esteárico estão dispostos sobre os átomos de enxofre. Para o orbital HOMO 0, o valor de energia calculado foi de -8,14 eV; enquanto para o orbital HOMO +4 a energia foi de -9,29 eV. Portanto, uma diferença de 1,15 eV. No complexo sulfurante ativo do ácido linolênico, o orbital HOMO +4 é deslocado para as insaturações presentes na cadeia carbônica e as energias calculadas foram: HOMO 0, -7,99 eV; e, HOMO +4, -9,30 eV. Uma diferença energética de 1,31 eV. Assim, ainda que o incremento de energia para se alcançar o orbital de fronteira HOMO 0 seja maior, as ligações duplas C=C proporcionam novos sítios reacionais e, conseqüentemente, oportunidades de ocorrência de reações laterais.

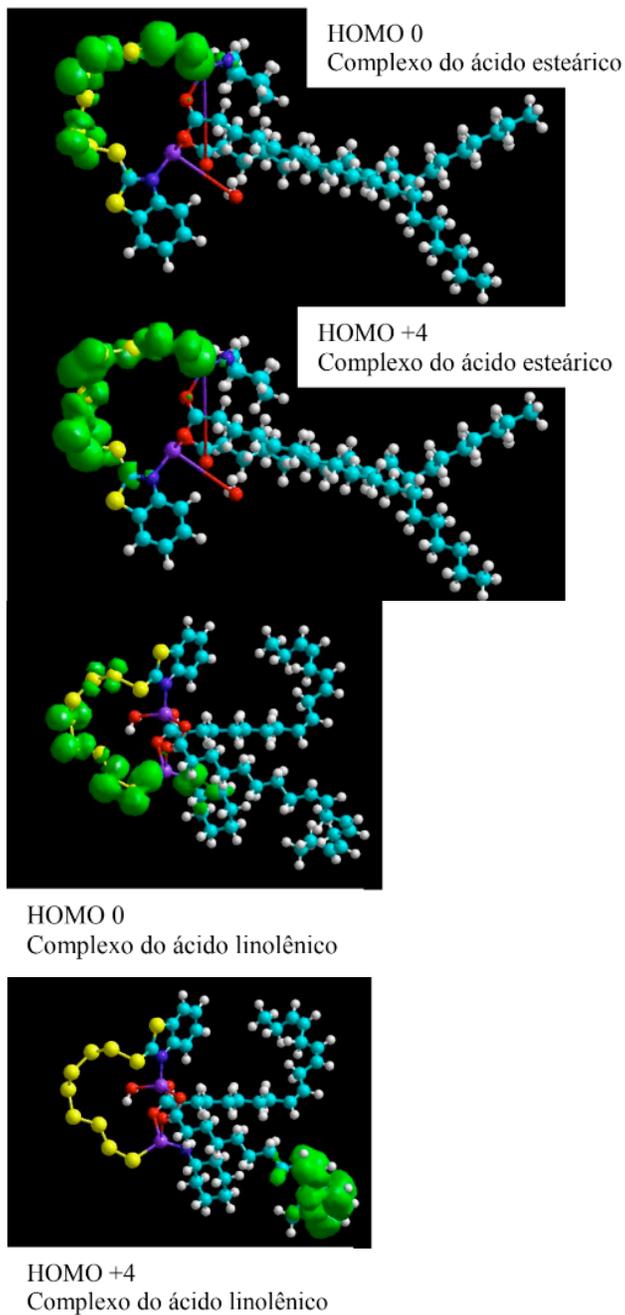


Figura 13 – Orbitais HOMO 0 e HOMO +4 representados para os complexos sulfurantes ativos gerados pelos fragmentos do acelerador CBS, ácidos esteárico e linolênico e oito átomos de enxofre

4 | CONCLUSÕES

A modelagem molecular através do método semiempírico AM1 foi implementada para o estudo das principais reações que ocorrem durante a vulcanização dos elastômeros NR e SBR. Os dados teóricos alcançados permitiram validar as observações experimentais encontradas nos trabalhos de Bezerra et al. (2013 *a e b*), Saboya (2014), Campbell (2016) e da Costa et al. (2017 *a e b*).

De um modo geral:

- I. Solubilidade na matriz elastomérica e aumento da reatividade ocasionada pela diminuição da dureza (*h*) são os fatores que permitem que ácidos graxos insaturados com 12 carbonos ou mais sejam úteis na vulcanização. Porém, ácidos graxos com cadeias carbônicas excessivamente grandes como o ácido lignocérico (24 átomos de C) não são ativadores eficientes em função do impedimento estérico gerado nas espécies químicas derivadas. Tais observações explicam o desempenho satisfatório do óleo de coco e a baixa eficiência da cera de abelha, respectivamente.
- II. Para ácidos graxos com 18 carbonos, a presença de insaturações permite uma diminuição da dureza das espécies, cuja magnitude depende do acelerador considerado no sistema de vulcanização – CBS ou TBBS. Porém, o ganho de reatividade das espécies, em particular, do complexo sulfurante formado pela reação (7), não se reflete em ganho efetivo de eficiência. As insaturações acabam por, provavelmente, permitir maior número de reações laterais indesejáveis, o que atenua a ação dos óleos de linhaça e amendoim, ricos em ácidos graxos insaturados, como ativadores.
- III. A utilização de produtos naturais como óleos vegetais se mostra verdadeiramente útil, considerando a substituição do ácido esteárico, somente se o óleo escolhido apresentar em sua composição química teores majoritários de ácidos graxos saturados com cadeias entre 12 e 18 átomos de C. A mesma consideração pode ser tomada como válida para outros produtos de origem natural.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem aos órgãos de fomento CAPES, CNPq e FAPERJ pelo suporte financeiro e ao Programa Pesquisa & Produtividade 2020 da UNESA/RJ.

REFERÊNCIAS

ALBUQUERQUE, C. A. **Modelagem molecular aplicada ao desenvolvimento de sistemas nanoscópicos bioativos**. 2008. 133 f. Dissertação (Mestrado em Materiais para Engenharia) – Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI), Itajubá, MG, 2008.

*BEZERRA, A.; SANTOS, A. C. S.; DA COSTA, H. M.; RAMOS, V. D. **Efeito do óleo de linhaça e do óleo de amendoim sobre a vulcanização da borracha natural (NR). Parte I: Modelo Generalizado**. *Polímeros*, v. 23, n. 3, p. 395-401, 2013.

^hBEZERRA, A.; SANTOS, A. C. S.; DA COSTA, H. M.; RAMOS, V. D. **Efeito do óleo de linhaça e do óleo de amendoim sobre a vulcanização da borracha natural (NR). Parte II: Modelo Detalhado.** *Polímeros*, v. 23, n. 4, p. 493-500, 2013.

CAMPBELL, B. C. **Análise térmica aplicada ao estudo das reações de vulcanização em elastômeros – efeito de óleos vegetais e da cera de abelha.** 2016. 142 f. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais) – Instituto Politécnico (IPRJ), Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Nova Friburgo, RJ, 2016.

CAREY, F. A. **Química Orgânica.** 7st ed., Porto Alegre: ARTMED Editora S.A., v. 2, 2011.

CHAPMAN, D. A. **Vulcanization of rubber. Model for efficient sulfenamide-sulfur systems.** *Journal of Elastomers and Plastics*, v. 10 (April), p. 129, 1978.

^aCORAN, A. Y. **Vulcanization. Part IV. The effects of compounding variables on the nature of rubber networks.** *Rubber Chemistry and Technology*, v. 37, p. 673, 1964.

^bCORAN, A. Y. **Vulcanization. Part V. The formation of crosslinks in the system: natural rubber – sulfur – MBT -zinc ion.** *Rubber Chemistry and Technology*, v. 37, p. 679, 1964.

^cCORAN, A. Y. **Vulcanization. Part VI. A model and treatment for scorch delay kinetics.** *Rubber Chemistry and Technology*, v. 37, p.689, 1964.

CORAN, A. Y. **Vulcanization. Part VII. Kinetics of sulfur vulcanization of natural rubber in presence of delayed-action accelerators.** *Rubber Chemistry and Technology*, v. 38, p. 1, 1965.

CTB – **Ciência e Tecnologia da Borracha.** Endereço eletrônico: www.ctborracha.com. Consulta em julho de 2020.

^aDA COSTA, H. M.; RAMOS, V. D.; SIRQUEIRA, A. S. **Influência dos óleos vegetais e da cera de abelha sobre a vulcanização do copolímero de estireno-butadieno (SBR).** *The Journal of Engineering and Exact Sciences (JCEC)*, v. 03, n. 7, p. 955-974, 2017.

^bDA COSTA, H. M.; RAMOS, V. D.; CAMPBELL, B. C.; DE ANDRADE, M. C. **Thermal analysis of the sulfur vulcanization. Part III: The role of linseed oil and peanut oil as activators.** *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, v. 129, v. 2, p. 755-766, 2017.

GHOSH, P.; KATARE, S.; PATKAR, P.; CARUTHERS, J. M.; VENKATASUBRAMANIAN, V.; WALKER, K. A. **Sulfur vulcanization of natural rubber for benzothiazole accelerated formulations: from reaction mechanisms to a rational kinetic model.** *Rubber Chemistry and Technology*, v. 76, n. 3, p. 592, 2003.

GUZMÁN, M.; VEGA, B.; AGULLÓ, N.; BORRÓS, S. **Zinc oxide versus magnesium oxide revisited. Part 2.** *Rubber Chemistry and Technology*, v. 85, n. 1, p. 56-67, 2012.

HYPERCHEM[®] Release 7 for Windows. Tools for Molecular Modeling. Hypercube Inc., January, 2002.

HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. **Ácidos, bases e íons em solução aquosa.** In: *Química Inorgânica.* 4st ed., Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda., v.1, cap. 7, p. 187, 2013.

IKEDA, Y.; YASUDA, Y.; OHASHI, T.; YOKOHAMA, H.; MINODA, S.; KOBAYASHI, H.; HONMA, T. **Dinuclear bridging bidentate zinc/stearate complex in sulfur cross-linking of rubber.** *Macromolecules*, v. 48, n. 3, p. 462-475, 2015.

JUNKONG, P.; MORIMOTO, R.; MIYAJI, K.; TOHSAN, A.; SAKAKI, Y.; IKEDA, Y. **Effect of fatty acids on the accelerated sulfur vulcanization of rubber by active zinc/carboxylate complexes.** *Royal Society of Chemistry*, v. 10, p. 4772-4785, 2020.

MESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A. **Orbitais moleculares.** In: *Química Inorgânica*, 5^ª ed., São Paulo: Pearson Education do Brasil, cap. 5, p. 117, 2014.

PEREIRA, D. H.; LA PORTA, F. A.; SANTIAGO, R. T.; GARCIA, D. R.; RAMALHO, T. C. **Novas perspectivas sobre o papel dos orbitais moleculares de fronteira no estudo da reatividade química: uma revisão.** *Revista Virtual da Química*, v. 8, n. 2, p. 425-453, 2016.

RIBEIRO, L. **Caracterização de estado sólido e análise computacional de uma nova forma cristalina do fármaco antifilariose dietilcarbamazina: um sal de ácido maleico.** 2011. 119 f. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física de São Carlos (IFSC), Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, SP, 2011.

SABOYA, J. C. C. **Efeitos dos óleos vegetais de linhaça e de amendoim sobre a vulcanização da borracha natural (NR).** 2014. 61 f. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais) – Instituto Politécnico (IPRJ), Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Nova Friburgo, RJ, 2014.

SCOTTI, L. **Modelagem molecular aplicada à cosmetologia: planejamento de compostos antienvhecimento.** 2006. 169 f. Doutorado (Programa de Pós-Graduação em Fármaco e Medicamentos) – Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, SP, 2006.

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W. **Química Inorgânica.** 3^ª ed., Porto Alegre: ARTMED Editora S.A., 2003.

SOLOMONS, T. W. G.; FRYHLE, C. B. **Química Orgânica.** 7^ª ed., Rio de Janeiro: LTC Editora, v. 1, 2001.

THANIKAIVELAN, P.; SUBRAMANIAN, V.; RAO, J. R.; NAIR, B. U. **Application of quantum chemical descriptor in quantitative structure activity and structure property relationship.** *Chemical Physics Letters*, v. 323, n. 1-2, p. 59–70, 2000.

YANG, J. K.; PARK, W.; RYU, C.; KIM, S. J.; KIM, D.; SEO, G.; KIM, J. H.; CHUNG, C. B. **Roles of sulfur and accelerators in the vulcanization of SBR compounds deduced through simulation.** *Rubber Chemistry and Technology*, v. 91, n. 3, p. 595-608, 2018.

ÍNDICE REMISSIVO

A

Absorbância 72, 73, 205, 212, 214

Adsorção 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 121, 127, 184, 186, 189, 190, 191, 192, 196, 201, 204, 205

Adsorvente 58, 59, 61, 62, 63, 64, 65, 69, 71, 72, 74, 79, 184, 186, 187, 188, 189, 190, 191

Águas superficiais 208, 209

Ambiente aquático 132, 185, 194

Analito 59, 60, 61, 62, 64, 65

B

Bactérias 128, 130, 136, 142, 146, 209

Bioadsorventes 58, 184, 218

Biocombustíveis 83, 158

Biodegradável 107, 158

Biodiesel 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 166, 167, 168, 169, 170, 173

Biogás 179

Biomassa 59, 65, 82, 83, 84, 86, 87, 92, 119, 120, 121, 123, 124, 128, 160

C

Carbono 7, 13, 16, 21, 30, 40, 54, 83, 210, 212

Celulose 59, 60, 66, 81, 82, 83, 85, 86, 87, 89, 90, 105, 116, 119, 120, 121, 124, 189

Coagulante 108, 117

Coliformes 116, 141, 142, 143, 145, 146

Condensador 148, 149, 150, 152, 153

Contaminação 26, 69, 215

Contaminantes emergentes 56, 185

Copolímero 13, 14, 20, 38

D

Degradação 65, 85, 127, 182, 194, 195, 197, 201, 202, 203, 204, 205, 207, 208, 209, 210, 212, 213, 214, 215, 216

Densidade 11, 29, 58, 107, 108, 112, 113

Desenvolvimento sustentável 2, 11

Dessorção 196, 201

Destilação 152

Diesel 157, 158, 160, 169, 170, 172, 173, 175, 176, 177, 179

Dióxido de titânio (TiO₂) 210

E

Ecosistema 129, 130

Espectroscopia 54, 61, 83, 86, 90, 184, 196

Estação de tratamento de esgoto (ETE) 65, 218

Estrutura amorfa 82, 83

F

Fármacos 64, 184, 185, 186, 194, 208

Fibras 60, 83, 86, 87, 96

Floculante 105, 106, 107, 110

Fluido 55, 148, 149, 150, 167

Fotoatividade 195, 213

Fotocatalisador 194, 203, 204, 210, 213

Fotocatálise heterogênea 194, 210

G

Granulometria 3, 4, 63, 84, 120, 190, 208, 212, 213, 216

H

Hidrofílico 21, 58

I

Indústria química 148

In natura 14, 59, 61, 64, 65, 67, 69, 71, 73, 74, 80, 83, 84, 85, 86, 87, 92, 120, 187, 188

L

Lignina 60, 61, 66, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 95, 96, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 105, 106, 107, 108, 110, 112, 113, 114, 115, 116, 119, 120

M

Mananciais 2, 208

Materiais lignocelulósicos 56, 59, 60, 61, 85, 120

Matéria-prima 2, 83

Matrizes ambientais 183

Meio ambiente 1, 2, 70, 80, 82, 87, 106, 116, 126, 128, 181, 184

Metais 2, 55, 56, 57, 58, 62, 63, 64, 69, 70, 127, 130, 138, 186, 210, 218

Microscopia eletrônica de varredura (MEV) 62, 184, 196, 211, 212

Mineral 70

Mineralização 212, 215

N

Nanomateriais 40

Nanopartículas 184, 186, 187, 188, 192, 194, 195, 197, 212, 213

O

Óleos 13, 14, 16, 17, 20, 22, 25, 26, 29, 31, 32, 33, 37, 38, 39, 157, 158, 160, 161, 162, 164, 169

Otimização 20, 54, 56, 58, 62, 63, 84, 105, 106, 122, 153, 165, 166, 168, 170

Oxidação 54, 63, 70, 127, 160, 194, 204, 215

P

Patógenos 127, 141, 209

Polímero 14, 60, 96, 106, 107, 112, 119

Polissacarídeos 61

Pré-tratamento 58, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 119, 120, 124, 125, 180, 182, 183, 210

Processos industriais 70, 82, 83

Processos oxidativos avançados 57, 194, 195, 208, 209, 210, 218

R

Radiação 61, 132, 195, 196, 200, 210, 216, 218

Reaproveitamento 1, 3, 12, 56, 126, 136, 138

Recursos hídricos 69, 127, 128

Remediação ambiental 56, 58, 218

Remoção 57, 59, 64, 65, 67, 69, 70, 73, 74, 78, 79, 82, 84, 87, 88, 105, 110, 113, 114, 115, 116, 127, 128, 130, 131, 139, 163, 182, 183, 184, 185, 186, 190, 191, 192, 201, 216, 218

Renovável 82, 83, 158, 160, 161

Resíduo 1, 2, 3, 7, 8, 9, 10, 11, 67, 81, 82

Resistência 1, 2, 7, 9, 10, 11, 14, 25, 58, 82, 118, 119, 122, 123, 124, 208

S

Semicondutor 213

Superfície 21, 61, 78, 79, 84, 110, 115, 130, 131, 132, 133, 143, 149, 186, 187, 188, 190,

196, 197, 204, 205, 211

T

Temperatura 1, 3, 4, 5, 8, 9, 10, 11, 17, 31, 63, 84, 95, 96, 98, 111, 112, 119, 120, 127, 136, 143, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 159, 161, 164, 166, 168, 182, 183, 187, 188, 189, 196, 197

Toxicidade 70, 194, 195, 209

Tratamento de efluentes 56, 57, 58, 65, 105, 126, 139, 208

Trocador de calor 148, 149, 152, 153, 154

Desenvolvimento e Transferência de Tecnologia na Engenharia Química 2

www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

Atena
Editora

Ano 2021

Desenvolvimento e Transferência de Tecnologia na Engenharia Química 2

www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

Atena
Editora

Ano 2021