

## Estudo da Interação de resinas com a Albita por Dinâmica Molecular

Julio C.G. Correia<sup>1</sup> (PQ), Alexandre M.N. Carauta<sup>2</sup> (PQ), Danielle S. Rosa<sup>1</sup> (PG), Leticia M. Prates<sup>1</sup> (IC), Luis G. L. da S. Pereira<sup>1</sup> (IC).

1- CETEM - Cidade Universitária - Rio de Janeiro. \*jguedes@cetem.gov.br

2- FTESM - Faculdade Técnico Educacional Souza Marques- Rio de Janeiro

Palavras Chave: Albita, resinas, dinâmica molecular.

### Introdução

O processo de resinagem na etapa do beneficiamento das rochas ornamentais é um processo importante para a estruturação e qualidade da chapa final. Além disso, a utilização da resina epóxi (Fig. 1) apresenta um fator preponderante na possibilidade de extinguir qualquer imperfeição que possa existir na superfície da chapa. A grande maioria das empresas no mundo utiliza esta resina, entretanto devido a sua toxicidade, resíduos das indústrias de rochas ornamentais, geram um passivo ambiental considerável. Assim sendo, resinas alternativas estão sendo estudadas, entre elas, a resina do óleo de mamona que é atóxica e biodegradável. O principal componente do óleo de mamona é o tri-ricinoleil glicerol (Fig. 2), derivado do ácido ricinoléico, que possui, em sua estrutura, três grupos funcionais altamente reativos: o grupo carbonila no primeiro carbono, a dupla ligação no 9º carbono e o grupo hidroxila no 12º carbono. Este trabalho teve por objetivo estudar as interações entre moléculas representativas da resina epóxi e do óleo de mamona com a albita (Fig. 3 e Fig. 4), um dos minerais componentes das rochas ornamentais, utilizando mecânica molecular e dinâmica molecular.

### Resultados e Discussão

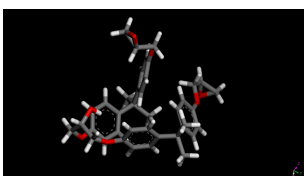


Figura 1

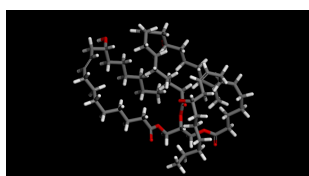


Figura 2

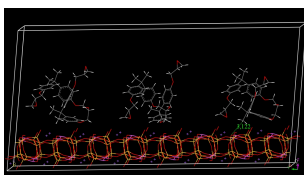


Figura 3

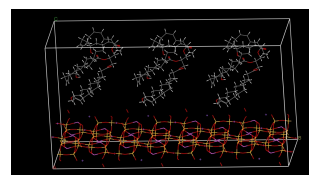


Figura 4

**Figura 1.** Estrutura mais estável da resina epóxi.

**Figura 2.** Estrutura mais estável do tri-ricinoleil glicerol.

**Figura 3.** Estrutura da interação albita-epóxi.

37ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

**Figura 4.** Estrutura da interação albita-mamona.

A Dinâmica Molecular (MD), utilizando o campo de força Dreiding, foi utilizada para calcular as conformações mais estáveis de cada uma das resinas que são apresentadas nas Figuras 1 e 2. Para o cálculo das interações entre as resinas e a albita, um cálculo de dinâmica molecular de 1 nanossegundo (1 ns), utilizando o mesmo campo de força, foi realizado. A partir do banco de dados cristalográficos, a estrutura do mineral albita foi construída. As Figuras 3 e 4 mostram as estruturas mais estáveis do sistema albita com as resinas após a realização da MD.

A Tabela 1 apresenta as entalpias de adsorção para as duas resinas com a albita.

**Tabela 1.** Entalpia de adsorção do sistema Albita-resina.

Sistema Resina-albita	$\Delta H_{ads}$ (kcal/mol)
Albita-Epóxi	36,61
Albita-Mamona	375,88

### Conclusões

As entalpias de adsorção calculadas mostram que em princípio a adsorção do tri-ricinoleil glicerol é preferencial à resina epóxi, no entanto, as rochas ornamentais não são formadas apenas pelo mineral albita e as resinas não são formadas unicamente por uma molécula apenas, daí estudos complementares experimentais e teóricos necessitam ser realizados para uma melhor investigação dessas interações, o que está em curso.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CETEM pela infraestrutura oferecida; a CATE, CNPq e a Profa. Dra. Elaine Maia da UnB.

<sup>1</sup> ALBUQUERQUE, C.A. *Modelagem Aplicada ao desenvolvimento de sistemas Nanoscópicos Bioativos*, Tese de doutorado- Universidade Federal de Itajubá, MG, 2008.

<sup>2</sup> CANGEMI, J.M. *Biodegradação de Poliuretano derivado do Óleo de Mamona*. 2006. Tese (Doutorado) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.