

## Aplicação de quimiometria na avaliação de coalescentes em emulsões

Marcelo B Graziani<sup>1\*</sup> (PG), Edenír Rodrigues Pereira Filho<sup>2</sup> (PQ)

1. Dow Brasil, mbgraziani@dow.com

2. Departamento de Química – Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), erpf@ufscar.br.

Palavras Chave: *Quimiometria, planejamento de experimentos, coalescente, Doehlert, PCA.*

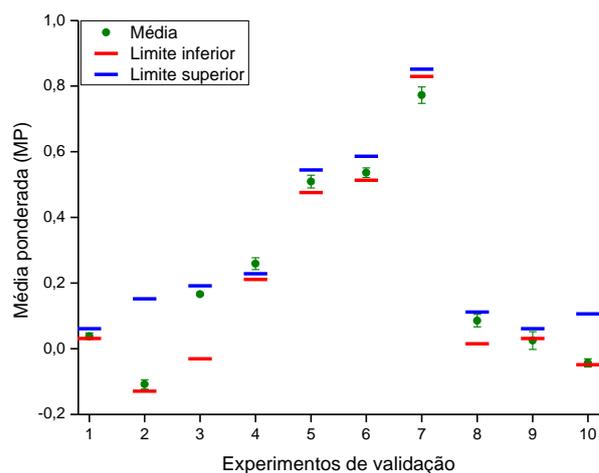
### Introdução

A aplicação de ferramentas matemáticas-estatísticas em química é observada em áreas que vão do desenvolvimento de produtos a otimização de processos [1]. Entretanto, a literatura é escassa sobre a aplicação de tais ferramentas no estudo de tintas e vernizes. As tintas têm sido utilizadas no recobrimento de superfícies para agregar valor a produtos ou proteger substratos. Desta forma, uma das características mais importantes para as tintas é a formação de um filme homogêneo, parcialmente poroso e livre de fissuras. Para atingir tal objetivo é comum a adição de coalescentes em tintas imobiliárias. A escolha do coalescente mais adequado é uma tarefa trabalhosa que envolve a realização de uma série de experimentos (muitas vezes realizados de forma univariada). Assim, este trabalho visou combinar diferentes ferramentas estatísticas, como Planejamento de Experimentos e Análise de Componentes Principais (PCA) para avaliar a formação de filme de emulsões estireno acrílica. As variáveis estudadas foram: concentração de coalescente (CC), tipo de coalescente (TC) e tipo de látex (TL). Para isto foram executados dois planejamentos do tipo Doehlert e as amostras foram caracterizadas em relação à resistência a abrasão úmida (RAU), temperatura mínima de formação de filme (TMFF) e tempo de secagem (TS).

### Resultados e Discussão

Nos dois planejamentos Doehlert foram testadas 11 diferentes concentrações de coalescentes (CC, de 0 a 5,0% p/p), 8 coalescentes (TC) e 5 latexes (TL). Os experimentos efetuados foram combinados e os níveis das três variáveis codificados entre -1 e +1. Com o objetivo de propor um modelo único para as três respostas (RAU, TMFF e TS), as mesmas foram normalizadas entre 0 (condição indesejada) e 1 (condição desejada). Com estas respostas foi obtida uma média ponderada (MP) com os pesos 3, 3, e 1 para a RAU, TMFF e TS, respectivamente. Além disso, com o intuito de extrair mais informações deste conjunto de dados foi efetuada uma PCA tendo como variáveis CC, TC, TL e MP. Estes dados foram auto-escalados e notou-se que a primeira componente principal (PC1) possuía altos valores de *loadings* para a MP. Desta forma, os *scores* da PC1 foram utilizados para propor um modelo correlacionando as variáveis CC, TC e TL

com a MP. Na proposição do modelo foram utilizados 42 experimentos sendo que 16 destes foram réplicas autênticas. Os coeficientes de regressão ( $\beta$ , 10 no total) foram calculados com a seguinte equação:  $\beta = (X^T X)^{-1} \times X^T Y$  [2]. Após a análise da variância e a exclusão dos coeficientes insignificantes ao nível de confiança de 95%, o modelo proposto foi estabelecido como:  $MP_{scores} = 1,71CC - 0,72TC - 0,87TL + 0,67TCTL$ . Este modelo foi avaliado com mais 10 experimentos de validação, que não foram utilizados na proposição do mesmo. A Figura abaixo mostra o gráfico com a faixa dos resultados previstos (linhas horizontais) e os resultados experimentais (círculos,  $\bar{x} \pm (DP \times 1,96)$ ) ambos com 95% de confiança.



### Conclusões

O modelo proposto mostrou-se bastante adequado, pois apenas dois experimentos (4 e 7) não ficaram posicionados dentro do intervalo de confiança dos valores previstos. Além disso, o modelo mostrou que todas as variáveis são importantes para a formação do filme (MP  $\cong$  1) e que há interação entre as variáveis TC e TL. Este tipo de abordagem foi útil na seleção de coalescentes mais adequados para um determinado tipo de látex.

### Agradecimentos

Ao CNPq.

<sup>1</sup> Muteki, K.; MacGregor, J. F.; Ueda, T.; *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2007**, *86*, 17.

<sup>2</sup> Barros Neto, B.; Scarminio, I. S.; Bruns, R. E.; Como fazer experimentos. Campinas: Editora da Unicamp, **2007**.