

Classificação Quanto à Origem de Amostras de Monômero Cloreto de Vinila (MVC) Através da Identificação de Contaminantes de Processo e Análise de Componentes Principais

Fábio N. dos Santos (PG)^{a*}, Lucas N. Horiuchi^b (PQ), Pedro A. de P. Pereira (PQ)^a

^aInstituto de Química, Universidade Federal da Bahia, Salvador, BA, Brasil

^bBraskem S.A, Camaçari, BA, Brasil

*e-mail: fabioneves_6@hotmail.com

Palavras Chave: Contaminantes, Cloreto de Vinila, Análise de Componentes Principais.

Introdução

O MVC é usado nos processos industriais de produção do poli(cloreto de vinila) (PVC). Sendo a matéria-prima principal, o controle da sua pureza é importante para a qualidade do produto final e o controle do processo. A Análise de Componentes Principais (PCA) é uma ferramenta estatística exploratória que permite verificar a existência ou não de relações e agrupamentos entre amostras¹. Desde que o MVC usado no processo de fabricação do PVC pode vir de diferentes pontos da planta, o objetivo deste trabalho foi aplicar a PCA para investigar possíveis tendências de agrupamento de amostras de MVC, bem como identificar as principais substâncias responsáveis por essas tendências, permitindo assim verificar desvios na composição dessa matéria-prima.

Resultados e Discussão

Foram coletadas amostras do MVC fresco e do recuperado após a polimerização, cada qual em um ponto, além de misturas de ambos em dois pontos. A pré-concentração dos contaminantes foi feita por adsorção em tubos contendo Tenax-TATM, seguida de desorção térmica em sistema TDA Dynatherm (CDS Analytical, Inc) a 320°C por 15 min. As análises foram feitas em um sistema Varian 431-GC/Varian 200-MS Ion Trap, com coluna capilar CP-PoraBOND U (25 m x 0.32 mm x 7µm) e a seguinte programação de aquecimento: 60°C (15 min) – 5°C/min – 280°C (1 min). O injetor foi mantido a 250°C com razão de split 20:1. O espectrômetro de massas operou no modo EI, varredura na faixa de 50-350 m/z, trap a 180°C, manifold a 50°C e linha de transferência a 250°C². Na etapa seguinte, foi feita a PCA no programa *Statística 7.0* (StatSoft, Inc.) utilizando-se um conjunto de dados correspondente à área dos picos de vinte e cinco substâncias nos cromatogramas de dezoito amostras. O gráfico dos scores das amostras de MVC na Figura 1 mostra a separação em três grupos distintos. A diferença do MVC recuperado (A) no agrupamento I em relação ao MVC fresco (C) no agrupamento II e a mistura de ambos (B e D) no agrupamento III, cuja variância está representada pela PC1 (47,61% da variância total), pode ser

atribuída, principalmente, aos contaminantes 1,3-butadieno e estireno. Por outro lado, a distinção entre o MVC fresco da torre de destilação (C) no agrupamento II, daqueles provenientes da esfera de armazenamento (D) e da entrada do reator de polimerização (B) no agrupamento III, que constituem misturas (fresco + recuperado), pode ser atribuída, principalmente, ao 2,4-hexadieno. A variância entre os agrupamentos II e III está representada pela PC2 (13,65% da variância total). O 1,3-butadieno e estireno têm sido relatados na literatura como sendo importantes inibidores de polimerização do MVC.

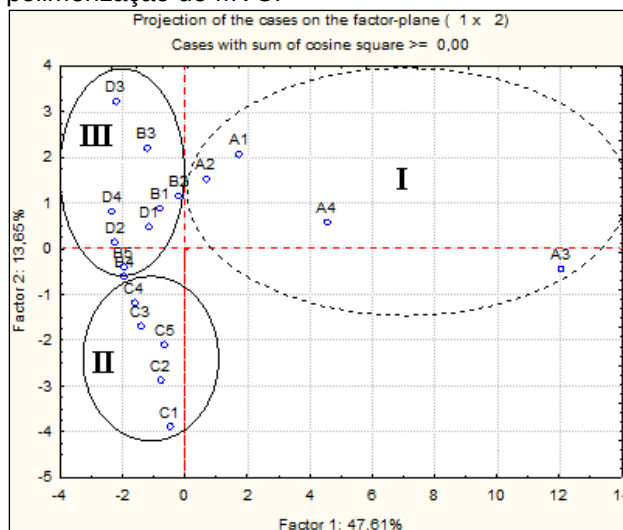


Figura 1. Gráfico dos scores de PC1 e PC2. (I) MVC recuperado; (II) MVC fresco; (III) misturas de ambos.

Conclusões

A informação obtida da PCA das amostras de MVC é importante, pois permite prever alterações na qualidade do PVC produzido, a partir da composição do MVC, fresco ou misturas com o recuperado, utilizado na polimerização.

Agradecimentos

FINEP, BRASKEM e CNPq. Agradecemos ao Prof. Dr. Fabio Santos de Oliveira (UFRB) pelas valiosas sugestões dadas para a realização da Análise de Componentes Principais.

¹ Lyra, W. da Silva.; da Silva, E. C.; de Araújo, M. C. U.; Frago, W. D.; e Veras, G., *Quim. Nova*. Vol. 33, No 7, 1594-1597, 2010.

²Santos, F. N.; Horiuchi, L. N.; Pereira, P. A. de P., painel MT 001, 16º ENQA, Campos do Jordão-SP, 2011.