

175

**MODELAGEM DA REAÇÃO DE FUNCIONALIZAÇÃO DE POLIPROPILENO COM VINILSIANO.**

*Fernanda Andreoli Chilanti, Argimiro R. Secchi, Sônia M. B. Nachtigall, Nilo Sérgio M. Cardozo* (Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, UFRGS).

O desenvolvimento de um simulador para reações de polimerização ou modificação de polímeros é fundamental para a predição das características estruturais do produto a partir do conhecimento das condições utilizadas no processo. Neste trabalho é feita a modelagem da reação de funcionalização do polipropileno com moléculas de vinilsilano através de mecanismo radicalar. Foi desenvolvido um modelo cinético específico para a funcionalização por radicais livres que considera as reações de iniciação, funcionalização, transferência de radicais, cisão  $\beta$ , terminação por combinação e terminação por desproporcionamento. O modelo utiliza o método dos momentos para chegar a expressões que relacionem os parâmetros da curva de distribuição de pesos moleculares com as constantes cinéticas das reações consideradas e as concentrações iniciais dos reagentes, permitindo prever a forma da curva de distribuição de peso molecular bem como o nível de incorporação de vinilsilano no produto final. Este modelo está sendo implementado em linguagem C, sendo que o ajuste das constantes cinéticas e o teste do modelo será feito a partir de dados experimentais obtidos no Instituto de Química da UFRGS. (FINEP)