

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA REAÇÃO DE FUNCIONALIZAÇÃO DO POLIPROPILENO COM VINIL-TRI-ETOXI-SILANO.** *André R. Muniz, Sônia M. B. Nachtigall, Nilo S. M. Cardozo, Argimiro R. Secchi* (Departamento de Engenharia Química - Escola de Engenharia - UFRGS).

Reações de funcionalização de polímeros são reações químicas em que moléculas de grupos funcionais são inseridas na cadeia polimérica. Estas reações são usadas para modificar um dado polímero, melhorando algumas propriedades físicas e/ou químicas deste, permitindo novas aplicações. Um exemplo é a funcionalização de Polipropileno com Vinil-Tri-Etoxi-Silano (VTES), usada para aumentar a adesão deste polímero com outros materiais. Esta reação de funcionalização se dá por um mecanismo de radicais livres, sendo utilizado um peróxido como iniciador. Um simulador capaz de prever as características do produto final a partir das condições iniciais da reação, é uma ferramenta muito útil. Foi desenvolvido então, um modelo para a reação de funcionalização em questão. Este modelo permite prever, a partir dos pesos moleculares médios ( $M_n$ ,  $M_w$ ,  $M_z$ ) do polímero a ser funcionalizado e das concentrações iniciais de peróxido e VTES, a incorporação do agente funcionalizante e os pesos moleculares médios do polímero funcionalizado, ao final da reação. Neste modelo, foram consideradas reações de iniciação, cisão, funcionalização, transferência de cadeia, degradação térmica e terminação. Para expressar a quantidade das espécies presentes na reação em função do tempo, foi utilizado o método dos momentos. As constantes cinéticas das reações foram estimadas seguindo uma metodologia para estimação de parâmetros baseada em uma prévia análise de sensibilidade paramétrica dinâmica. Para efetuar esta estimação e validar o modelo, foram utilizados dados experimentais de reações partindo de diferentes condições iniciais, realizadas em um câmara de mistura HAAKE, em regime batelada. O modelo desenvolvido, juntamente com as constantes estimadas, representa bem o comportamento do sistema, levando a bons resultados para os pesos moleculares e para incorporação de funcionalizante. (CAPES).