

ESTUDO DA INTERAÇÃO ENTRE RESINAS E A ALBITA COMPONENTE DE ROCHAS ORNAMENTAIS

Letícia Maia Prates

Aluno de Graduação de Química 7º período, FTESM

lprates@cetem.gov.br

Julio Cesar Guedes Correa

Orientador, Químico Industrial, D.Sc.

jguedes@cetem.gov.br

Alexandre Carauta

Co-orientador, Químico, D.Sc., FTESM

ancarauta@uol.com.br

1. INTRODUÇÃO

A resinagem é uma etapa fundamental para o beneficiamento de rochas ornamentais, possuindo o propósito de remover alguma possível imperfeição presente, melhorar a qualidade e estruturação da peça (LOPES, 2003) e ainda auxiliar na proteção contra agentes externos que possam danificá-la. Atualmente, o principal produto usado para esta finalidade é a resina epóxi, que apresenta como um inconveniente a toxicidade. O óleo de mamona é uma substância biodegradável e menos tóxica e o triglicerídeo do principal ácido graxo componente, tri-ricinoleil glicerol, possui em sua estrutura grupos funcionais bastante reativos que podem interagir com minerais possibilitando o seu uso para esta finalidade.

2. OBJETIVOS

Avaliar por meio de mecânica e dinâmica molecular e ainda análise de ângulo de contato a interação entre o óleo de mamona e o mineral albita, componente de granitos, para a verificação de viabilidade do uso dessa resina na etapa de resinagem em rochas ornamentais e comparação com a interação com a resina epóxi.

3. METODOLOGIA

3.1 Construção e otimização das estruturas

As estruturas do tri-ricinoleil glicerol e da resina epóxi foram construídas com o software *Materials Visualizer*. Ambas foram submetidas a uma otimização de geometria para obtenção de uma melhor estrutura de partida com o uso do campo de força *Dreiding*, no módulo do programa *Forcite* com o método de otimização *Conjugate Gradient*, todos presentes no pacote de programas *Materials Studio 4.3.0.0*.

3.2 Dinâmica molecular

Após a otimização de geometria por mecânica molecular, foi feita a dinâmica molecular para a obtenção da conformação mais estável, sendo utilizado o campo de força *Dreiding*, temperatura fixa em 298 K, e tempo de dinâmica de 1 ns.

A análise de trajetória a partir dos dados obtidos permitiu varrer o espaço conformacional. Um gráfico foi gerado em função da energia (Kcal/mol) e do tempo, tendo sido descartadas as 1000 primeiras estruturas que correspondem ao início da dinâmica onde o sistema ainda está energeticamente instável. As demais estruturas foram postas em ordem crescente de energia, selecionando-se as 5 estruturas que possuíam menor energia para as duas resinas.

As estruturas selecionadas passaram por uma segunda geometria de otimização usando o mesmo campo de força para a seleção da estrutura mais estável. A frequência de cada estrutura foi calculada pelo método semiempírico AM1 no software *Gaussian 03W 6.0* para garantir que as estruturas eram mínimos de energia. Após, as energias obtidas foram novamente analisadas para a escolha da estrutura mais estável.

3.3 Interação resina-albita

A estrutura do mineral albita foi obtida pelo banco de dados cristalográficos do software *Materials Studio* e com as estruturas mais estáveis das resinas selecionadas anteriormente foram montadas estruturas em condições periódicas de contorno (PBC) para a simulação da interação do sistema albita-epóxi e albita-mamona. Ambas foram otimizadas utilizando o campo de força *Dreiding* para posterior cálculo de dinâmica molecular.

3.4 Experimental

3.4.1 Preparação das amostras

Foram utilizadas três amostras de chapas de granito, um puro, um resinado com uma camada de resina epóxi e outro resinado com uma camada de óleo de mamona. Dessas chapas, foi retirada uma fina lâmina que foi posteriormente britada, pulverizada e peneirada para obtenção de material em granulometria entre 0,297 mm e 0,420 mm.

3.4.2 Análise de ângulo de contato

As medidas de ângulo de contato foram feitas pelo tensiômetro Krüss K100. As amostras foram pesadas e compactadas em um cilindro a uma altura de aproximadamente 2 cm, por onde é feita a ascensão capilar. O tubo possui um filtro poroso em sua extremidade. Utilizou-se os solventes n-hexano e água.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Modelagem molecular

Os resultados obtidos com a otimização do sistema resina-albita mostraram que a interação ocorre efetivamente sendo energeticamente favorável. A energia de estabilização pôde ser calculada através da Equação 1.

$$\Delta E = E_{\text{ligado}} - E_{\text{não-ligado}} \quad (1)$$

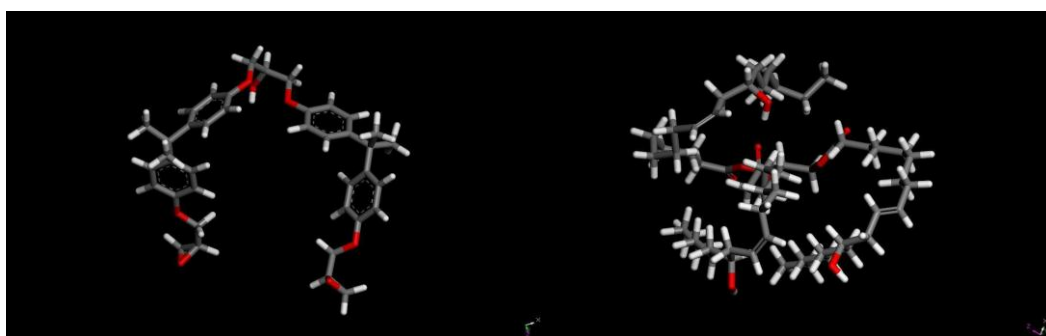
Os valores de energia obtidos após a otimização são expressos na Tabela 1.

Tabela 1: Diferença de energia de interação das duas resinas com a albita antes e após a realização da geometria de otimização

Sistema resina-albita	ΔE (kcal/mol)
Albita-Epóxi	-225,48
Albita-Mamona	-1406,23

As moléculas das duas resinas foram postas inicialmente a uma distância em torno de 5 Å da estrutura do mineral albita e foi observado que após a realização da geometria de otimização, as distâncias para ambos sistemas diminuiram mostrando que há interação entre as resinas e o mineral.

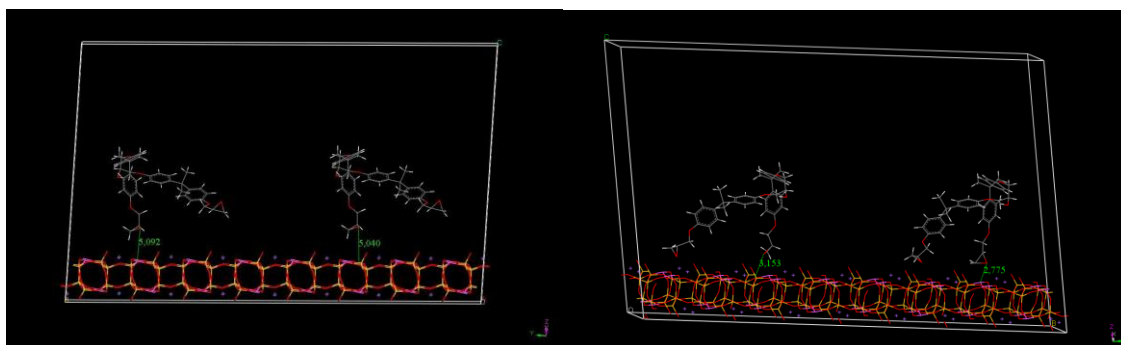
De acordo com os valores de energia, a interação com o tri-ricinoleil glicerol mostrou-se mais forte do que com a resina epóxi devido ao valor mais baixo apresentado de diferença de energia do sistema ligado e não-ligado. As Figuras 1, 2 e 3 abaixo mostram as representações das estruturas.



(a)

(b)

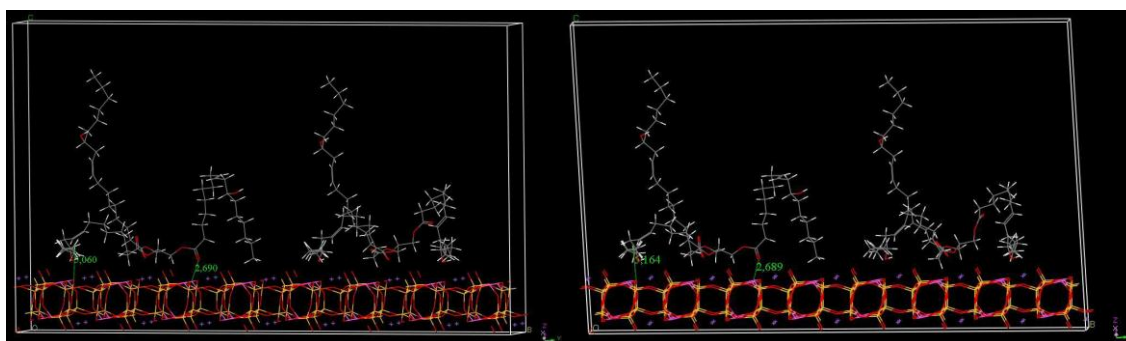
Figura 1: (a) Estrutura mais estável da resina epóxi e (b) Estrutura mais estável do tri-ricinoleil glicerol.



(a)

(b)

Figura 2: (a) e (b) Interação da resina epóxi com a albita antes e depois da geometria de otimização, $E = 677,50$ kcal/mol e $E = 452,02$ kcal/mol, respectivamente.



(a)

(b)

Figura 3: (a) e (b) Interação do tri-ricinoleil glicerol com a albita antes e depois da geometria de otimização, $E = 651,45$ kcal/mol e $E = -754,78$ kcal/mol, respectivamente.

4.2 Ensaio de ângulo de contato

Os valores obtidos de ângulo de contato puderam corroborar com os resultados dos cálculos de mecânica e dinâmica molecular. A Tabela 2 mostra os resultados encontrados.

Tabela 2: Valores de ângulo de contato para o solvente água.

Amostra	Massa (g)	Ângulo
Granito puro	2,26900	40,91°
Granito-Epóxi	2,26956	66,65°
Granito-Mamona	2,26191	68,24°

A análise de ângulo de contato é uma forma de medir a interação entre uma superfície e um líquido. Pelos resultados, pode-se observar que o valor do ângulo de contato entre a água e um granito resinado com o óleo de mamona é maior do que com um resinado pela resina epóxi. Esse resultado sugere que o óleo de mamona impermeabilizaria melhor esse mineral, visto que ele interagiria menos com a água, o que complementa o observado pela modelagem molecular, o óleo de mamona interage mais fortemente com o mineral, possibilitando o seu emprego na etapa de resinagem. Cálculos de dinâmica molecular ainda serão feitos para a interação entre as resinas e a albita para obtenção de mais resultados e melhor compreensão dos mesmos.

5. CONCLUSÕES

Pôde-se concluir que o óleo de mamona pode ser uma alternativa de produto para uso na etapa de resinagem de rochas ornamentais, visto que é capaz de interagir com a estrutura de minerais e ainda apresenta a capacidade de impermeabilização superior à das resinas epóxi comumente utilizadas, resultado observado tanto por método computacional como experimental. Ressalta-se ainda que mais simulações e experimentos ainda serão feitos para uma melhor avaliação e conclusão.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CETEM pela infraestrutura oferecida, a CATE e a química Debora Sanchez pelo auxílio nas análises.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CALDARA, J.A, **Modelagem Molecular do Óleo de Mamona para Uso de Polimento de Rochas Ornamentais**, XIX Jornada de Iniciação Científica, CETEM, Rio de Janeiro (2011).

LOPES, L., **Resinagem em Chapas de Granito**, Dissertação de Mestrado, Instituto de Química, UFCE, 2003.

ROSA, D.S, **Estudo da Interação Albita-Ácido Ricinoleico por Dinâmica Molecular**, XXI Jornada de Iniciação Científica, CETEM, Rio de Janeiro (2013).

VIEGAS, T.Y, **Estudo de Ângulo de Contato da Apatita e Calcita na Presença de Lauroyl Sarcosinato de Sódio pelo Método de Ascensão Capilar**, XX Jornada de Iniciação Científica, CETEM, Rio de Janeiro (2012).