

ESTUDO DA INTERAÇÃO ENTRE O CARDANOL E A ALBITA COMPONENTE DAS ROCHAS ORNAMENTAIS

Kelly Fernandes Pessoa

Aluno de Graduação de Química 8º período, FTESM
Período PIBIC/CETEM : setembro de 2014 a julho de 2015,
kpessoa@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

Abstract

The resin of ornamental rocks is a process of improvement of utmost importance, as the resin is to structure the material and improve the surface quality of the same. The cardanol present in the liquid from the shell of the cashew nut (CNSL) has physicochemical characteristics differentiated that allow you great chemical combinations and can be used in various industries and is a viable, low-cost option for polymeric products research achievements in the production of resins, since he owns resistant to water and chemicals. Molecular modeling based on computational methods for the simulation of systems as close as possible to the real, can study prior to manufacture, if the derived resin liquid can favour the process of resin.

Key words: Resin, Cardanol, Molecular Modeling

Resumo

A resinagem de rochas ornamentais é um processo de beneficiamento de extrema importância, pois a resina tem como função de estruturar o material e melhorar a qualidade da superfície da mesma. O cardanol presente no líquido da casca da castanha de caju (LCC) possui características físico-químicas diferenciadas que lhe permitem grandes combinações químicas podendo ser utilizadas nas mais diversas indústrias e é uma opção viável e de baixo custo para realizações de pesquisas de produtos poliméricos para a produção de resinas, já que ele possui propriedade de resistência à água e a produtos químicos. A modelagem molecular que se baseia em métodos computacionais para a simulação de sistemas o mais próximo possível do real, pode estudar antes da fabricação, se a resina derivada do líquido poderá ser favorável ao processo de resinagem.

Palavras chave: Resinagem, Cardanol, Modelagem Molecular.

1. INTRODUÇÃO

O processo de resinagem em rochas ornamentais é de suma importância, através do mesmo, ocorre à estruturação do material ocasionando melhora na qualidade na superfície da chapa removendo uma eventual imperfeição e ainda preservando a rocha contra ação de intempéries causadas por agentes do meio externo (LOPES, 2003). Atualmente, o principal produto usado para esta finalidade é a resina epóxi, que apresenta como inconvenientes a toxicidade e não biodegradabilidade. O líquido da casca da castanha de caju é uma substância biodegradável e menos tóxica e que pode ser encontrada com abundância em terras brasileiras. Seu principal componente o cardanol, possui em sua estrutura grupos funcionais bastante reativos que podem interagir com minerais possibilitando o seu uso para esta finalidade (MAZZETTO *et al.*, 2009).

A Teoria do Funcional de Densidade (*Density Functional Theory* – DFT) é bem estabelecida e não sofre influência de frequentes e injustificáveis aproximações no procedimento computacional. Não há a necessidade de seus parâmetros serem ajustados e determinados empiricamente e por isso pode ser caracterizada como uma teoria derivada do método *ab initio* (MORGON; CUSTODIO, 1995). Ela inclui os efeitos da correlação eletrônica, isto é, os elétrons reagem ao movimento de outros no sistema molecular. Por ser um método que não trata os elétrons de cada orbital individualmente, mas como densidades eletrônicas, ele tem um custo computacional menor e isso favorece o uso da DFT para se estudar grandes sistemas moleculares representando de forma real sistemas orgânicos, inorgânicos metálicos e semicondutores. Além do ganho em velocidade computacional e espaço em memória.

2. OBJETIVOS

Avaliar por meio de mecânica e dinâmica molecular em conjunto com o método quântico de funcional de densidade (DFT), a interação entre o líquido da casca da castanha de caju, o LCC, representado pelo seu principal componente, o cardanol e o mineral albita, um dos componentes principais dos granitos, para a verificação de viabilidade do uso dessa resina na etapa de resinagem em rochas ornamentais.

3. METODOLOGIA

3.1 Construção e otimização das estruturas

A estrutura do cardanol foi montada com o *software Materials Visualizer*. A mesma foi submetida a uma otimização de geometria através do método de mecânica molecular, com o uso do campo de força *Dreiding*, no módulo do programa *Forcite*, presentes no pacote de programas *Materials Studio 4.3.0.0*.

3.2 Dinâmica molecular

Após a otimização de geometria por mecânica molecular, foi realizada uma dinâmica molecular para realizar uma análise conformacional a fim de se obter a conformação mais estável, para isso utilizou-se o campo de força *Dreiding*, nas seguintes condições: temperatura fixa em 298 K, e tempo de dinâmica de 1 ns.

Uma análise da trajetória foi realizada e foram descartadas as 1000 primeiras estruturas que correspondem ao início da dinâmica onde o sistema ainda está energeticamente instável. As outras estruturas foram colocadas em ordem crescente de energia, selecionando-se as três estruturas que possuíam menor energia para o cardanol.

As três estruturas selecionadas foram novamente submetidas a uma segunda otimização de geometria 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*. Esse procedimento foi necessário para garantir que as estruturas possuíam mínimos de energia.

3.3 Interação cardanol-albita

A estrutura do mineral albita foi obtida pelo banco de dados cristalográficos do software *Materials Studio* e com a estrutura mais estável do cardanol já selecionada na etapa anterior, foram montadas estruturas em condições periódicas de contorno (PBC) para a simulação da interação do sistema albita-cardanol. A mesma foi otimizada utilizando os parâmetros já estipulados anteriormente isto é, o campo de força *Dreiding*.

3.4 Cálculo Quântico – Teoria do Funcional de Densidade (*Density Functional Theory - DFT*)

A partir da estrutura mais estável da interação cardanol-albita calculado pelos métodos de mecânica e dinâmica molecular, foi adequada uma estrutura deste sistema para a realização de cálculo por DFT no software *Gaussian 03W 6.0*. O funcional B3LYP foi utilizado com a base LANL2DZ para a albita e a base 6.311G+ (d,p) para o cardanol. A fim de estudar as interações entre o mineral e a resina em um nível de cálculo mais aprofundado onde as interações eletrônicas são consideradas.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados obtidos com a otimização por mecânica molecular do sistema cardanol-albita mostraram que a interação ocorre de fato, sendo favorável energeticamente. A energia de estabilização pôde ser calculada através da Equação 1.

$$\Delta E = E_{LIGADO} - E_{NÃO LIGADO} \quad (1)$$

O valor de energia obtido após a otimização é expresso na Tabela 1.

Tabela 1: Energia pós-otimização de geometria para o sistema cardanol - albita ligado e não-ligado.

Sistema cardanol - albita	E (kcal/mol)
Ligado	-38246.41
Não ligado	-17415.58

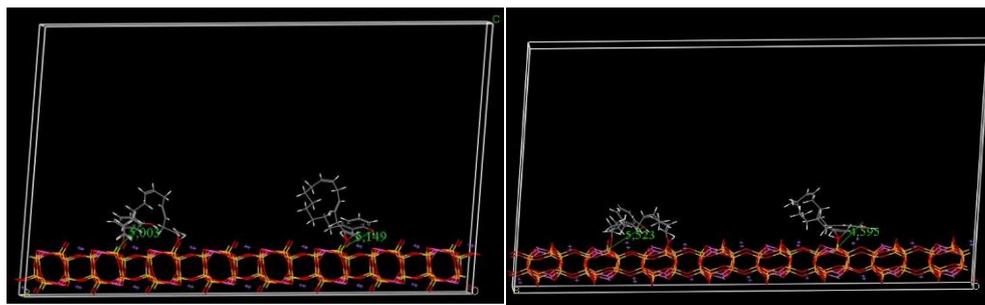


Figura 1: Sistema ligado antes e depois da otimização de geometria

$$\Delta E = -20830.83 \text{ kcal/mol}$$

A otimização de geometria possibilitou a observação de diversas propriedades do sistema. A análise da energia dos termos não-ligados do campo de força mostra que a interação intermolecular que mais colaborou para a adsorção do cardanol ao mineral foi a interação eletrostática.

Tendo em vista os resultados obtidos pela mecânica e dinâmica molecular, cálculos DFT estão sendo realizados a fim de estudar os efeitos eletrônicos desta interação.

5. CONCLUSÃO

O estudo do sistema aplicando os métodos de mecânica e dinâmica molecular viabilizou a análise do processo de interação do cardanol, principal constituinte do líquido da casca da castanha de caju com a albita, presente em maior quantidade nos granitos, no que se diz respeito aos sítios e energias responsáveis para acontecer a interação. A interação intermolecular do tipo eletrostática foi a que mais contribuiu para o processo de adesão, nos mostrando que a distribuição das cargas tanto na superfície do mineral quanto no cardanol são importantes no processo de quimissorção. Os dados apresentados mostram que o cardanol adsorve quimicamente na superfície da albita e pode ser usado como uma opção de protetivo natural para resinagem de rochas ornamentais, podendo ser corroborados pelos cálculos DFT, ainda em andamento.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CETEM pela infraestrutura oferecida, a CATE, especialmente aos integrantes do laboratório de modelagem molecular (LabMol), e ao CNPq pela bolsa de iniciação científica.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

LOPES, L. **Resinagem em Chapas de Granito**, CE. 2003. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2003.

MAZZETTO, S. E.; LOMONACO, D.; MELE, G. Óleo da castanha de caju: oportunidades e desafios no contexto do desenvolvimento e sustentabilidade industrial. **Química Nova**, v. 32, n.3, p. 732-741, 2009.

MORGON, N.H.; CUSTÓDIO, R.; Teoria do funcional de densidade. **Química Nova**, v. 18, n.1, p. 44-55, 1995.