

# MODELAGEM MOLECULAR DO ÓLEO DE MAMONA PARA USO NO POLIMENTO DE ROCHAS ORNAMENTAIS



**Júlio Athanzio Caldara**

Engenharia Química, 8º período, UFRJ

Período PIBIC/CETEM : janeiro de 2010 a julho de 2011,

[jcaldara@cetem.gov.br](mailto:jcaldara@cetem.gov.br)

**Julio Cesar Guedes Correia**

Orientador, Químico, D.Sc.

[jguedes@cetem.gov.br](mailto:jguedes@cetem.gov.br)

## 1. INTRODUÇÃO

A utilização de resinagem em rochas ornamentais é importante na estruturação do material, assim como na melhora da qualidade da chapa. Outra finalidade da resina pode ser na eliminação de algumas imperfeições, tais como rachaduras e trincas. A evolução dessas técnicas causou uma melhoria na qualidade do material e conseqüentemente uma maior valorização dos mesmos. Hoje, quase 100% das rochas ornamentais exportadas são resinadas (Lopes, 2003).

O óleo de mamona é composto de cerca de 90% do triglicerídeo ricinoléina (componente do ácido ricinoléico). Tal ácido é pouco freqüente nos óleos vegetais e se caracteriza por seu alto peso molecular (298 g/mol), baixo ponto de fusão (5 °C) e por sua estrutura química possuir três grupos funcionais altamente reativos (carboxila, insaturação e hidroxila). Esses grupos funcionais fazem com que o óleo de mamona possa ser submetido a diversos processos químicos, nos quais pode ser obtida uma enorme gama de produtos.

## 2. OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é prever a viabilidade da utilização do óleo de mamona como resina em dois tipos de granitos de composições químicas e mineralógicas distintas. Isto foi feito através da utilização do programa de modelagem molecular *Hyperchem 7.0*.

## 3. METODOLOGIA

Utilizaram-se dois tipos de granitos, que apresentaram comportamentos diferenciados no processo de resinagem. As amostras foram fornecidas por uma empresa de rochas ornamentais, da cidade de Cachoeiro de Itapemirim – ES e serão chamados de granitos A e B. Os dois tipos de granito foram britados, moídos e peneirados para obtenção de uma amostra com tamanho de partícula inferior a 0,037 mm que serviu de base para os ensaios de análise química e análise mineralógica. Os granitos foram caracterizados por meio de análises mineralógicas e químicas no Laboratório de Análises Químicas da Coordenação de Análises Minerais (COAM), do Centro de Tecnologia Mineral (CETEM).

Por meio do programa *Hyperchem 7.0*, modelou-se a estrutura do ácido ricinoléico (principal constituinte do óleo de mamona), a partir de informações da literatura. Foi feita uma otimização geométrica da estrutura utilizando o módulo *geometry optimization*.

Os cristais de quartzo e feldspato foram modelados através do módulo *Crystals* do programa *Hyperchem 7.0*, e utilizando o banco de dados presente no site *American Mineralogist Crystal Structure Database*.

As interações entre os minerais e a molécula do ácido ricinoléico foram feitas utilizando o módulo *molecular dynamics* em temperaturas distintas (25 e 45 °C). Ao final das interações, eram obtidas as energias potenciais totais dos sistemas.

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 4.1. Análise Mineralógica dos Granitos

Os resultados da análise mineralógica estão apresentados na tabela 4.1. Pode se nota composições extremamente diferentes, uma vez que o granito A apresenta teor alto de quartzo (cerca de 38%), e um baixo teor de feldspato (cerca de 50%). Já o granito B apresenta alta concentração de feldspato (74%) e baixo teor de quartzo (12%). Observa-se teores de biotita similares em ambos os granitos. Tais resultados serviram como parâmetros para modelagem das estruturas dos minerais quartzo e feldspato no programa de modelagem molecular para interação com o ácido ricinoléico, pois, possivelmente, um desses minerais é o responsável principal pela ancoragem da resina na superfície do granito, devido às variações percentuais significativas apenas desses minerais.

Tabela 4.1. Composição Mineralógica dos Granitos.

Minerais	Granito A (%)	Granito B (%)
Feldspato	49,7	74,3
Quartzo	37,6	12,2
Biotita	12,1	13,0

### 4.2. Análise Química dos Granitos

Os resultados obtidos na análise química das rochas estão apresentados na tabela 4.2. Mostram alto teor de SiO<sub>2</sub> em ambas as rochas, porém em maior proporção no granito A, corroborando os ensaios de análise mineralógica que indicaram um alto teor de quartzo neste granito. Em relação ao granito B, observam-se maiores teores de ferro, cálcio e sódio, possivelmente, pela maior proporção de feldspato encontrado nesse granito (Deer *et al*, 1996).

Tabela 4.2. Composição química dos Granitos.

Composição	Granito A (%)	Granito B (%)
SiO <sub>2</sub>	71,33	51,42
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14,6	15,8
K <sub>2</sub> O	5,0	4,47
Na <sub>2</sub> O	3,27	3,96
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1,8	9,33
CaO	1,4	6,15
MgO	--	1,44

### 4.3. Avaliação da Interação Óleo/Rocha por meio da Modelagem Molecular

A energia potencial da molécula do ácido ricinoléico após a otimização foi de 17,24 kcal/mol, assim como as energias potenciais do feldspato e quartzo foram de 1114,01 kcal/mol e 173,97 kcal/mol, respectivamente.

Os resultados obtidos no processo de interação Óleo/Rocha estão apresentados na Tabela 4.3. Através dos valores apresentados na tabela, observa-se que todos os sistemas apresentaram

valores de energia potencial inferiores às somas das energias potenciais do ácido e do mineral isolados (sem interagir):

➤ Ácido isolado (17,24 kcal/mol) + Feldspato isolado (1114,01 kcal/mol) → 1131,25 kcal/mol;

➤ Ácido isolado (17,24 kcal/mol) + Quartzo isolado (173,97 kcal/mol) → 191,21 kcal/mol.

Isto denota que a interação é viável, ou seja, quanto maior a diferença entre as somas das energias do ácido + mineral isolados e as energias do ácido + mineral interagidos, mais favorável é a interação. A maior diferença foi apresentada na interação com feldspato (1131,25 – 84,36 = 1046,89 kcal/mol); esta representa a melhor interação entre os minerais e o óleo. Tal fato pode estar relacionado à presença em sua estrutura do átomo de alumínio altamente polarizante capaz de produzir uma forte atração dipolo-dipolo com a estrutura do ácido.

Tabela 4.3. Energias dos Sistemas Óleo/Rocha

Interação	Energia (kcal/mol)		
	Carboxila	Hidroxila	Insaturação
Óleo/Quartzo (25 °C)	91,77	80,09	101,40
Óleo/Quartzo (45 °C)	97,11	84,65	104,46
Óleo/Feldspato (25 °C)	84,36	91,75	95,54
Óleo/Feldspato (45 °C)	88,89	96,71	100,36

Verifica-se também que a interação entre o granito A (maior proporção de quartzo) e o óleo é mais efetiva na posição próxima da hidroxila. Já para o granito B (maior proporção de feldspato), a interação é mais efetiva na posição próxima à carboxila.

Nota-se também que o aumento da temperatura causa aumento da energia potencial dos sistemas, portanto, desfavore as interações entre os minerais e o óleo.

Conclui-se que a adsorção ou ancoragem do óleo na superfície dos granitos é favorecida em granitos que apresentam o mineral feldspato em maior proporção em sua estrutura. Com isso, pode-se determinar, por meio de análises mineralógicas prévias nos granitos, se o processo de resinagem terá ou não um bom desempenho.

É um grande passo na pesquisa para utilização do óleo de mamona como resina, pois trata-se de uma matéria-prima vegetal e economicamente viável. A continuidade desse trabalho será a execução de ensaios em laboratório para se obter uma comparação entre as rochas estudadas e óleo de mamona, para se obter a adsorção físico química da superfície de interação.

## 5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CETEM pela infra estrutura oferecida; a Karen Gonçalves Rachelle e ao CNPq pelo suporte financeiro.

## **6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

NETO, S.C., Usos e Aplicações do Óleo de Mamona, III Congresso Brasileiro de Mamona, Salvador, BA, Brasil, 2008.

DEER, W. A., HOWIE, R. A. e ZUSSMAN, J., “Minerais Constituintes das Rochas – Uma Introdução”, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, Portugal, 1966.

DOWNS, R.T. & HALL-WALLACE, M., The American Mineralogist Crystal Structure Database, American Mineralogist 88, 2003, pp. 247-250.

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

SANTOS, F. F. P, MALVEIRA, J. Q., DIAS, F. P., FERNANDES, F. A. N., Análise de Superfície de Resposta na Produção de Biodiesel a partir dos Blends do Óleo de Mamona e Babaçu, IV SEPRONE, Fortaleza, CE, Brasil, 2009.

[http://sistemasdeproducao.cnptia.embrapa.br/FontesHTML/Mamona/CultivodaMamona\\_2ed/oleo.html](http://sistemasdeproducao.cnptia.embrapa.br/FontesHTML/Mamona/CultivodaMamona_2ed/oleo.html) > Acesso em: 9 jun. 2011.