

## RESUMO

O objetivo do presente trabalho é a otimização experimental, modelagem matemática e simulação do processo de pré-polimerização fotoiniciada do metacrilato de metila (MMA), visando a produção de um pré-polímero com distribuição estreita de massas moleculares (MWD) e conversão de monômero definida.

Os experimentos foram realizados em dois sistemas experimentais em batelada, compostos por reatores fotoquímicos anulares e tanques de recirculação. No primeiro sistema experimental empregou-se uma lâmpada de mercúrio de média pressão, Heraeus TQ 150W. No segundo uma fonte de radiação de excímeros de xenônio e cloro (XeCl) alimentada por um gerador de pulsos e operada em uma larga faixa de frequências de pulsos (840Hz – 46,4 kHz) foi empregada.

Avaliaram-se as evoluções experimentais da concentração de benzoína (iniciador fotoquímico), da concentração do monômero e da concentração e distribuição de massas moleculares do pré-polímero, em função do tempo de irradiação, para diferentes condições de frequência de pulsos de excitação, de concentração inicial de iniciador e de vazão de circulação. Para tanto, empregaram-se técnicas de análise como espectrofotometria, actinometria química (ferrioxalato), medidas de cromatografia por exclusão de tamanho e em fase reversa.

As otimizações foram realizadas segundo dois planejamentos experimentais baseados na matriz Doehlert. As variáveis do processo escolhidas afetam significativamente as características do produto final, devido as diferentes condições de taxa de produção de radicais primários que se mostrou como etapa chave no controle da MWD e conversão do monômero.

A modelagem matemática baseou-se nos balanços de massa, quantidade de movimento e transporte de fótons. Os mecanismos de geração de di-radicais monoméricos e dos radicais primários a partir das reações fotoquímicas foram incluídos em um modelo baseado na cinética clássica de polimerização por radicais livres. Os balanços foram desenvolvidos de acordo com o método dos momentos da distribuição de tamanhos de cadeia. O modelo matemático proposto foi validado confrontando-se os dados experimentais com os resultados simulados por um programa de fluido dinâmica computacional (PHOENICS).