

301

NOVAS METODOLOGIAS PARA DETERMINAÇÃO DO ÍNDICE DE HIDROXILAS EM POLIÓIS. *Rafael Bitello Silva, Marco Flôres Ferrão, Daniela Fachini, Annelise Engel Gerbase (orient.) (UFRGS).*

Polióis são utilizados na preparação de poliuretanas com aplicação na produção de espumas flexíveis e rígidas, revestimentos, adesivos e termoplásticos. Para tanto é importante conhecer o índice de hidroxilas (vOH) do poliól. Este é determinado por métodos padrões que precisam um tempo longo de análise e o uso de grandes quantidades de amostra e de reagentes químicos tóxicos, como piridina e anidrido acético. O uso da espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) utilizando acessório de reflexão total atenuada horizontal (HATR) torna-se interessante como alternativa aos métodos padrões por ser uma técnica de baixo custo, menor tempo de análise, utilizar pequenas quantidades de amostra e não gerar resíduos químicos. O objetivo deste trabalho foi desenvolver um método simples, preciso, rápido, reproduzível para ser utilizado na determinação do vOH de polióis por FTIR-HATR. Para isso foram obtidos espectros de 33 amostras de polióis de origem vegetal e petroquímica, com vOH de 28 a 584 mg KOH/g. O software Unscrambler foi usado para desenvolver o estudo dos componentes principais (PCA) e o modelo de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS). No modelo de calibração foram usados 24 polióis com variados valores de vOH, onde a melhor curva de calibração foi obtida com coeficientes de correlação de 0,953 e RMSEC de 34,24 para duas variáveis latentes, na região de 4000 a 3330 cm^{-1} . A previsão foi realizada utilizando 9 polióis, obtendo-se RMSEP de 30,22. Portanto foi possível através da construção de um modelo PLS a obtenção de um modelo de previsão do vOH em polióis de origem petroquímica e vegetal utilizando espectroscopia FTIR-ATR, mas ainda é necessária a construção de um modelo mais robusto, para obter-se maior precisão. No prosseguimento do trabalho também será verificada a correlação do modelo com outras propriedades dos polióis, tais como viscosidade e massa molar. (PIBIC).