

■ TECNOLOGIA

QUÍMICA

Caminho mais curto

Parceria entre a Unicamp e a Rhodia encontra novas soluções para processos industriais da empresa

DINORAH ERENO

U

m novo processo produtivo na indústria química começa, quase sempre, pela escolha do solvente mais apropriado para a formulação de um novo medicamento, uma tinta com secagem mais rá-

pida ou mesmo um xampu que ajuda a desembaraçar o cabelo. Selecionando o solvente adequado, que nada mais é do que um líquido, como a acetona, o benzeno, o álcool e muitos outros, é possível separar um ingrediente de uma substância complexa. Mesmo que o produto final seja um sólido, os processos de fabricação industrial em suas etapas iniciais geralmente partem de bases líquidas. Em testes tradicionais nos laboratórios, a fase de experimentação para identificar os solventes mais indicados para um novo produto, ou mesmo para modificar formulações que já se encontram no mercado, pode demorar vá-



Pedras de ácido benzóico em teste de solvente: experimento ganhou *software* que agiliza o processo

rios dias e até semanas. Agora um *software* desenvolvido em parceria entre a Rhodia Brasil e a Faculdade de Engenharia Química (FEQ) da Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) permite tornar esse processo mais rápido, com grande economia de tempo.

Resposta rápida - “A ferramenta trouxe um grande benefício para nós, que é a velocidade de resposta aos problemas dos nossos clientes e agilidade no desenvolvimento de novos processos produtivos”, diz Richard Macret, diretor de pesquisa e desenvolvimento da empresa para a América Latina. A empresa é subsidiária do grupo Rhodia, com sede na França e unidades industriais em quase cem países, que tem como foco química fina, fibras e polímeros. Anteriormente, a Rhodia já havia desenvolvido outro *software* para procurar a melhor mistura de sol-

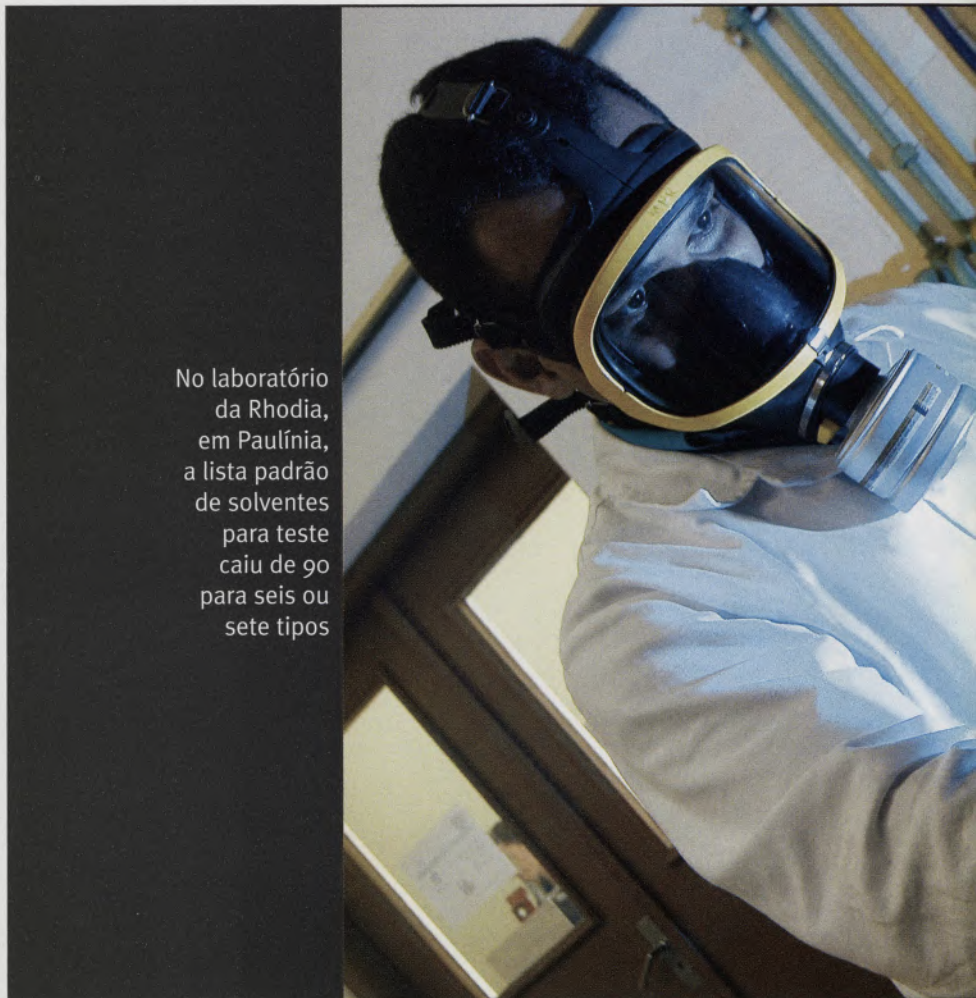
ventes para polímeros. Mas ele não conseguia prever a solubilidade – a quantidade máxima de um sólido que pode ser dissolvido em um solvente – de uma grande classe de produtos, que são os sólidos cristalinos. Nessa categoria química, assim chamada por conta da arrumação molecular, que segue sempre um padrão regular de distribuição, encontram-se, por exemplo, os princípios ativos dos medicamentos.

Antes de começar a utilizar o novo *software*, resultado de um projeto de pesquisa financiado pela FAPESP no âmbito do programa Parceria para Inovação Tecnológica (PITE), a Rhodia trabalhava com uma lista padrão de cerca de 90 solventes, tanto para produzir seus produtos como para atender aos pedidos dos clientes. “Eles faziam experimentos com cada um deles, um processo lento, caro e não muito apropriado”, conta o professor Martín Aznar, coordena-

dor do projeto. “Desenvolvemos uma ferramenta que permite restringir essa lista a apenas seis ou sete solventes, mas que ainda assim é representativa”, diz. Para criar o *software*, os pesquisadores tomaram como base um modelo teórico, chamado de metodologia de Hansen, utilizado na indústria química desde a década de 1970 para formulação de produtos com polímeros, que são os plásticos, as borrachas e os silicones, e solventes orgânicos, especialmente tintas. Mas esse método ainda não havia sido usado para os sólidos cristalinos.

Fase de equilíbrio - O modelo empregado para determinar os valores de solubilidade utiliza três parâmetros, chamados de força de dispersão, força polar e ligações de hidrogênio. Essas três variáveis atuam na interação das moléculas do reagente e do sólido. Ao utilizar essa metodologia é possível identificar solventes ou misturas de solventes mais apropriados para dissolver polímeros. Os pesquisadores estenderam a aplicação dessa técnica para os sólidos cristalinos. E foram além. “Antes do nosso trabalho, os parâmetros de solubilidade eram determinados a partir de informações quantitativas”, diz Aznar. Esse tipo de informação é obtido pela avaliação do equilíbrio de fases entre sólido e líquido. Para entender como funciona, basta recorrer a uma imagem simples: o ponto de dissolução do açúcar na água. Em determinado volume, a água é capaz de dissolver o açúcar. Mas quando o açúcar começa a se depositar no fundo do recipiente a solução está saturada, ou seja, atingiu o ponto de equilíbrio. Para chegar ao resultado procurado usando essa metodologia é necessário utilizar uma grande quantidade de reagentes.

Uma das mudanças propostas pelo projeto é o uso de dados qualitativos. Por esse método, basta pegar um tubo de ensaio, colocar uma quantidade padrão de solvente puro, estipulada em 0,9 grama para 0,1 grama de sólido, e deixar agitando durante 24 horas em uma máquina que faz a mistura na posição vertical.



No laboratório da Rhodia, em Paulínia, a lista padrão de solventes para teste caiu de 90 para seis ou sete tipos

D

essa forma, tanto o sólido como o solvente ficam em contato o tempo todo. Para fazer o teste, são utilizados 47 frascos com diferentes solventes.

“É um método mais rápido e barato que o quantitativo, porque é só olhar se o sólido dissolveu ou não”, diz Marlus Pinheiro Rolemberg, que também participou da pesquisa como bolsista de pós-doutorado. No laboratório da FEQ, na Unicamp, por causa do tamanho do agitador, os frascos utilizados são os tradicionais tubos de ensaio. Já na Rhodia os recipientes de vidro são minúsculos e não chegam a 5 centímetros de comprimento. Dessa forma, há uma diminuição nos gastos com os reagentes para fazer os testes de solubilida-

de e no tempo de resposta. Com as informações qualitativas e a metodologia de Hansen, o programa desenvolvido na Unicamp indica quais os solventes mais indicados para trabalhar com sólidos cristalinos e também com polímeros. Os mais apropriados aparecem indicados na tela do computador.

As pesquisas que levaram ao desenvolvimento do *software* foram feitas em parceria com o Centro de Pesquisas de Paulínia, um dos cinco do grupo francês no mundo, responsáveis pelo desenvolvimento de aplicações e de novos produtos e processos. Outros dois estão instalados em Lyon e Aubervilliers, na França, um em Cranbury, nos Estados Unidos, e o último em Xangai, na China. Eles funcionam interligados, como uma rede. “Quando há um problema de solvência na França, nos Estados Unidos ou na China, eles nos procuram para saber qual o solvente recomendado para determinada aplicação”, diz Macret. No final do ano pas-



sado, o *software* foi utilizado para solucionar um problema detectado em um produto desenvolvido em um dos centros de pesquisa da França. Por questão de sigilo industrial, os pesquisadores disseram apenas tratar-se de um catalisador (substância utilizada para modificar a velocidade de uma reação química), que, testado em escala piloto em laboratório, estava reagindo com um solvente. “Eles queriam ter opções de outros solventes”, conta Rolemberg. “Fizemos os testes e apontamos quais os mais adequados para aquela molécula que eles estavam trabalhando.”

Além de fabricar solventes, a empresa também atende a solicitações de clientes que necessitam mudar algo em suas fórmulas por conta de problemas ambientais, de legislação ou até porque o solvente usado reage com o produto. “A demanda pela troca por solventes mais eficazes tem aumentado tanto na Europa como nos Estados Unidos e está vindo para o Brasil”, diz Macret. “O

software nos dá a indicação de quais solventes podemos utilizar nessa troca. Em vez de testar seis, vamos diretamente para dois ou três.” A ferramenta é tratada pela Rhodia como uma peça importante porque auxilia os projetos desenvolvidos no laboratório nas eta-

pas iniciais do processo industrial. “Ela permite entrar em um ângulo que outros *softwares* não conseguem”, diz Macret. Para os pesquisadores, o caminho para chegar ao *software* e a aplicação da metodologia de Hansen para sólidos cristalinos resultaram em artigos científicos que estão em fase de preparação.

Lança-perfume - O centro de pesquisas da Rhodia localizado em Paulínia, cidade vizinha de Campinas, encontra-se dentro de uma antiga fazenda comprada pela empresa em 1944 para plantar cana-de-açúcar e produzir álcool. Foi nesse centro que foi criada uma nova linha de produtos para tratamento de couro e estudos de utilização de polímeros em xampus que têm a função de domar cabelos crespos. De origem francesa, a empresa instalou-se no Brasil em dezembro de 1919 para fabricar o cloreto de etila, principal componente do lança-perfume, produto que foi um grande sucesso de vendas da empresa no país em antigos Carnavais. A primeira fábrica foi instalada em Santo André, no Grande ABC paulista, destinada à produção de produtos químicos e farmacêuticos. Com o passar do tempo ampliou seu campo de atuação e começou a trabalhar no desenvolvimento de fios têxteis sintéticos. O primeiro foi a poliamida, usada na confecção de meias e maiôs, que depois passou a ser utilizada para outras aplicações também fora do setor têxtil, como na produção de pneus.

A empresa brasileira emprega cerca de 3 mil pessoas e, em 2003, teve faturamento da ordem de R\$ 1,8 bilhão. No mundo, o grupo possui 23 mil funcionários e faturou em torno de € 5,4 bilhões em 2003. Os investimentos anuais em pesquisa e desenvolvimento, que englobam os centros de pesquisa e laboratórios espalhados pelo mundo, são de cerca de € 180 milhões. No Brasil ficam em torno de R\$ 30 milhões por ano. Os investimentos nesse setor incluem também o estreitamento das parcerias com as universidades. Para o professor Aznar, essa interação é importante e útil para as duas partes. “A empresa consegue resolver um problema prático usando o conhecimento acadêmico e a universidade pode aplicar o seu conhecimento e gerar um resultado valioso para a sociedade.”

O PROJETO

Predição da solubilidade de polímeros polares e sólidos cristalinos em misturas de solventes

MODALIDADE

Programa Parceria para Inovação Tecnológica (PITE)

COORDENADOR

MARTÍN AZNAR – Faculdade de Engenharia Química da Unicamp

INVESTIMENTO

R\$ 50.505,00 (Rhodia)
e R\$ 15.997,00 (FAPESP)