

ABSORÇÃO DE ÁGUA EM MATERIAIS COMPÓSITOS USANDO O MODELO DE LANGMUIR: UMA NOVA FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Wanessa Raphaella Gomes dos Santos¹; Helton Gomes Alves²; Severino Rodrigues de Farias Neto³;
Antonio Gilson Barbosa de Lima⁴

¹ PRODEP/UFCG, wanessa.raphaella@yahoo.com.br

^{2,3} UAEQ/UFCG, helton.02@hotmail.com; s.fariasn@gmail.com

⁴ UAEM/UFCG, gilson@dem.ufcg.edu.br

Introdução

Materiais compósitos consistem em dois ou mais materiais insolúveis entre si os quais são combinados para formar um material útil de engenharia possuindo certas propriedades não obtidas pelos seus constituintes separadamente. Nos dias atuais, este tipo de material vem ganhando cada vez mais importância pois cria materiais multifásicos artificialmente que adquirem uma combinação desejável das melhores propriedades de suas fases constituintes.

Os materiais compósitos são convencionalmente classificados de acordo com a sua natureza química e física em: cerâmicos, metálicos e poliméricos. Os materiais cerâmicos são inorgânicos e têm como características principais, elevada resistência ao calor e sua extrema fragilidade; os materiais metálicos apresentam como características gerais, ductilidade e excelente condutividade térmica e elétrica e os materiais poliméricos, em geral, tem boa estabilidade dimensional, boas propriedades térmicas e elétricas e resistência química.

Estes materiais são constituídos por uma fase de reforço (fibras, partículas ou folhas) dispersa em uma matriz (fase contínua). A matriz é responsável pelo aspecto externo do compósito e pela proteção do reforço contra ataques químicos e físicos. A principal função da matriz é dispersar ou aglomerar a fase de reforço e, quando submetido a uma tensão, deve deformar o necessário a fim de distribuir e transferir as tensões para o componente do reforço enquanto que as fibras, particularmente, são reforços eficientes que têm como função suportar as cargas transmitidas pela matriz.

Dentre os diversos tipos de materiais compósitos, destacam-se os compósitos poliméricos reforçados por fibra vegetal, que vem sendo investigado pela comunidade científica e industrial na busca de novos materiais que possam substituir eficientemente os diversos materiais sintéticos já que são biodegradáveis, renováveis e de baixo custo em relação aos reforços atualmente empregados. No entanto, estudos atuais mostram que a maior dificuldade na utilização dessas fibras como reforço em compósitos poliméricos está associada a absorção de umidade que tem influência sobre as propriedades físicas e químicas dos compósitos, daí a importância do estudo detalhado deste comportamento.

Particularmente deve-se considerar o efeito da umidade presente no ar atmosférico no desempenho estrutural dos compósitos de matriz polimérica. Umidade absorvida pode levar a plastificação da matriz e, assim, afetar as propriedades mecânicas dos compósitos. Devido a importância, este processo de absorção de umidade tem sido estudado de forma teórica e experimental por vários autores - Carter e Kibler (1978); Carvalho et al. (2013); Silva (2014).

Vários modelos de difusão têm sido propostos para considerar o transporte de umidade em compósitos. Dentre os modelos mais utilizados, encontra-se o modelo de Fick pela sua simplicidade. Como modelo mais completo destaca-se o modelo de Langmuir por considerar a existência de moléculas livres e aprisionadas e a interação química para a ocorrência da ligação entre moléculas de água e cadeia polimérica.

O modelo de Fick fornece uma aproximação com as características de absorção de umidade, raramente fornece uma descrição completa da captação dos dados, tende a

superestimar a taxa de absorção, especialmente para tempos de curta duração, e é incapaz de explicar alterações induzidas no polímero pelo penetrante como variações dimensionais, degradação ou fissuras.

O modelo de Langmuir inclui as interações moleculares água-polímero ao assumir que as moléculas de água podem existir em um ou dois estados (livre ou ligado) e que existe um processo de troca dinâmica entre os dois estágios. Assim, este modelo considera a existência de moléculas de água livre e aprisionadas e interação química para ocorrência da ligação entre moléculas de água e as cadeias poliméricas.

A partir da importância do conhecimento da melhor caracterização da difusão nestes materiais, o presente trabalho em andamento tem como objetivo desenvolver a solução analítica das equações governantes (modelo de Lagmuir) utilizando o método de Laplace para prever a absorção de umidade em materiais compósitos poliméricos reforçados com fibra vegetal.

Metodologia

No desenvolvimento do modelo matemático tridimensional do transporte de massa fez-se as seguintes considerações:

- ✓ Sólido homogêneo e isotrópico, com forma de um paralelepípedo;
- ✓ Coeficiente de difusão constante ao longo do processo;
- ✓ Processo transiente;
- ✓ Mecanismo de transporte de água puramente por difusão;
- ✓ Sólido considerado completamente seco no início do processo.

O modelo de Langmuir considera os parâmetros λ (probabilidade de uma molécula de água livre ser aprisionada no interior do sólido) e μ (probabilidade de uma molécula aprisionada se tornar livre) adicionalmente a Lei de Fick. O modelo de Langmuir é descrito como sendo $\delta C/dt = \text{Div}(D \text{Grad} C) - \delta S/dt + \delta S/dt = \lambda C - \mu S$. Em que C representa a concentração do soluto livre para difundir dentro do material, o S representa a concentração do soluto aprisionado, o D é o coeficiente de difusão de massa (moléculas livres) e t é o tempo.

Para encontrar a solução exata tridimensional do problema físico, deve-se inicialmente determinar a solução exata unidimensional, e posteriormente expandir para a tridimensional pela multiplicação da solução 1D. O problema físico estudado consiste na absorção de água em um material sólido na forma de um paralelepípedo com dimensões $2R_1 \times 2R_2 \times 2R_3$. A amostra esta imersa em água a uma distância l_1 , l_2 e l_3 da parede do recipiente.

A partir do entendimento do problema físico e geometria estudada, verificou-se as condições de contorno e iniciais. Como o sólido é considerado completamente seco no início do processo, então, as equações devem satisfazer as seguintes condições: $C=S=0$, em $t = 0$, para todo o domínio.

Assumindo que o material é isotrópico, tem-se a seguinte condição de contorno:
 $\delta C/dt = \pm D \delta C/dx$ em $x = \pm R_1$, $t > 0$; $\delta C/dt = \pm D \delta C/dy$ em $y = \pm R_2$, $t > 0$ e $\delta C/dt = \pm D \delta C/dz$ em $z = \pm R_3$, $t > 0$.

Resultados e discussão

Para a solução exata das equações dadas, utilizou-se o método da Transformada de Laplace que reduz o problema de resolução de equação diferencial a um problema puramente algébrico. Este método consiste em três etapas:

- ✓ Transformar a equação diferencial dada em uma equação algébrica (equação subsidiária);
- ✓ Resolução desta equação por manipulações puramente algébrica;
- ✓ Transforma-se a solução da equação subsidiária em sentido contrário de tal maneira que forneça a solução da equação diferencial original.

Aplicando a transformada de Laplace nas equações do modelo de Langmuir e utilizando as condições de contorno do problema dado, obtém-se as transformadas de Laplace para C e S e a partir daí desenvolveu-se a solução analítica do problema estudado. Para o desenvolvimento da solução analítica, foram utilizados vários conceitos matemáticos: método de separação de variáveis, fórmula de Euler e o teorema da unicidade. Para resolver uma equação diferencial parcial por separação de variáveis, supõe-se que uma solução pode ser expressa como o produto de duas funções desconhecidas, em que uma delas é função de apenas uma das variáveis independentes e a outra das restantes. A equação resultante é descrita de modo a que um dos membros dependa apenas de uma das variáveis e o outro das variáveis restantes. Sendo assim, cada um dos membros terá de ser uma constante, o que vai permitir determinar as soluções. Assim, após a utilização de todas essas técnicas e finalizando com o método de expansão em frações parciais, chega-se a transformada inversa de C e conseqüentemente a solução analítica do problema estudado, para encontrar o valor de S, utiliza-se do mesmo procedimento.

A quantidade total de umidade presente no material, em qualquer instante de tempo, é dada por $M = S + C$. Assim sendo, conhecendo o teor de umidade dentro do material pode-se obter o teor de umidade médio dado pela integral volumétrica $\int M dV$, finalizando a solução analítica do problema tridimensional.

Conclusões

A partir da revisão bibliográfica e do estudo e resolução analítica das equações para análise da absorção de água, verificou-se a importância do estudo mais detalhado do Modelo de Langmuir para o transporte de massa em compósitos poliméricos reforçados com fibras vegetais, uma vez que o não conhecimento profundo da cinética de absorção de água pode ampliar fortemente a degradação que, dependendo da intensidade, pode provocar a quebra do compósito.

Palavras-Chave: absorção de umidade, compósitos poliméricos; modelo de Langmuir; transformada de Laplace.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da FINEP, CAPES e CNPq.

Referências

CALLISTER Jr., W. D.; *Ciência e Engenharia dos Materiais*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 7ª Ed. 2007.

CARTER, H. G.; KIBLER, K. G.; *Langmuir-Type model for anomalous moisture diffusion in composite resins*, Journal of Composite Materials, vol. 12, n. 2, p. 118-131, 1978.

CARVALHO, L. H.; CANEDO, E. L.; FARIAS NETO, S. R.; LIMA, A. G. B.; SILVA, C. J.; *Moisture transport process in vegetable fiber composites: theory and analysis for technological applications*, Industrial and Technological Applications of Transport in Porous Materials, Advanced Structure Materials, vol. 36, p. 37-62, 2013.

CRANK, J.; *The Mathematics of Diffusion*. Briston, England: Clarendon Press, 1975.

SILVA, C. J.; *Absorção de água em materiais compósitos de fibra vegetal: Modelagem e simulação via CFX*, Dissertação de Mestrado – Engenharia Mecânica, UFCEG, 2014.