



RELAÇÃO ESTEQUIOMÉTRICA BÁSICA DE POLIURETANOS

VALORES BÁSICOS DOS POLIÓIS E ISOCIANATOS – PESO EQUIVALENTE – RELAÇÃO NCO/OH

A reação química dos compostos de poliuretanos se dá pela combinação dos grupos hidroxila (OH) e grupos NCO dos isocianatos.

A proporção da mistura se baseia na relação mutua dos grupos reativos dos componentes. Polioli (OH)/Isocianato (NCO) com equivalência em peso (NCO:OH = 1:1). Este **“Valor Base”** pode ser calculado pela seguinte equação:

$$\text{VALOR BASE} = \frac{42 \times 100}{17 \times \% \text{NCO}} \times \% \text{OH}$$

(42 = peso molecular do grupo NCO)
(17 = peso molecular do grupo OH)

Os valores percentuais dos polióis e isocianatos, %OH e %NCO respectivamente, podem ser calculados mas achamos desnecessário abordar neste trabalho, já que são informados nos boletins técnicos de cada fabricante dos produtos.

Existe **outra possibilidade de calcular** as quantidades de Polioli e Isocianato através dos **“Pesos Equivalentes”**. Estes valores se encontram em algumas literaturas dos produtos disponíveis no mercado, ou podem se obtidos com as seguintes equações:

$$\text{PESO EQUIVALENTE DO ISOCIANATO} = \frac{42}{\% \text{NCO}} \times 100$$

(42 = peso molecular do grupo NCO)

$$\text{PESO EQUIVALENTE DO POLIOL} = \frac{17}{\% \text{OH}} \times 100$$

(17 = peso molecular do grupo OH)

Para conhecer melhor as características do Polióis e Isocianatos consulte a literatura abaixo:



Cooperativismo em Materiais Compósitos

“Diversos tipos de polióis são encontrados no mercado mundial. Os mais consumidos são os polióis poliéteres de diferentes estruturas a base de poli(oxipropileno) e poli(oxipropileno/etileno) (PPG's) (69%) (Capítulo 1), seguidos dos polióis poliésteres (19%) (Capítulo 1). Além desses polióis temos ainda os: polióis poliméricos, poli(oxitetrametileno) glicóis (PTMEG's ou PTHF's) (Capítulo 1), policaprolactonas glicóis (<2%) (Capítulo 1), polióis acrílicos, polibutadieno líquido hidroxilado (PBLH) (<1%) (Capítulo 1), polióis derivados do óleo de mamona (<1%) (Capítulo 1), etc...” (Walter Vila -Doutor em Ciência) <http://poliuretanos.com.br/Capa/inicial.htm>

“Vários isocianatos aromáticos e alifáticos estão disponíveis comercialmente, porém mais de 95% dos isocianatos consumidos são à base do tolueno diisocianato (TDI) (31%) (Capítulo 1) e do metileno-difenil-isocianato (MDI) (66%) ...” (do mesmo autor)

RELAÇÃO NCO/OH

A relação estequiométrica NCO/OH = 1:1, visa combinar 1 equivalente de Isocianato com 1 equivalente de Polioli.

Como exemplo, tomando-se um polioli com P.Eq. 262, e um isocianato com P.Eq. 324, a relação de mistura deve conter 324 gramas de isocianato, para 262 gramas de polioli, para uma relação NCO:OH = 1:1.

Teoricamente a determinação da mistura pode ser calculada da seguinte forma:

$$\text{RELAÇÃO DA MISTURA} = \frac{\text{Partes em peso do Isocianato X Peso equivalente do Polioli}}{\text{Partes em peso do Polioli X Peso equivalente do Isocianato}}$$

No entanto, **na prática**, as composições de sistemas denominados Poliuretano (PU), bi componentes, na grande maioria, são formulados a partir de polióis, ou mistura de polióis com diferentes características, aditivados, pigmentados, cargueados, diluídos, etc., formando um produto (componente A) que receberá o Isocianato (componente B). Sendo assim, todo material reativo do polioli (A) que contenham hidroxila (OH) deve ser calculado para manter a relação com o Isocianato (B).

Cálculo de quantidade de isocianato para determinada formulação, por “Equivalente grama” = mg/g = **mEq**

$$\text{EQUIVALENTE GRAMA} = \text{mg/g} = \frac{\% \text{ OH} \times 33}{56,1}$$

$$\text{RELAÇÃO DA MISTURA} = \frac{\text{Massa do Polioli} \times \text{Eq. Grama do polioli}}{1000} \times \text{peso equivalente do Isocianato}$$



Cooperativismo em Materiais Compósitos

Exemplificando um composto formado por:

30 partes de polioliol 1 com %OH = 1,1 = 0,65 mg/g

10 partes de polioliol 2 com %OH = 4,9 = 2,88 mg/g

03 partes de glicol ? com %OH = 54,7 = 32,18 mg/g

57 partes de outros (não reativos)

Isocianato MDI cru = p.Eq. 135

$$\text{ISOCIANATO P/ 100 g. DO COMPOSTO} = \frac{30 \times 0,65 + 10 \times 2,88 + 3 \times 32,18}{1000} \times 135 = \frac{144,84}{1000} \times 135 = \mathbf{19,55 \text{ g.}}$$

OBS.: Costuma-se adotar uma relação de segurança de NCO : OH = 1 : 1,1

FONTES BIBLIOGRÁFICAS :

Literatura Bayer – “Sistema DD”

Eng. Ricardo Tarquinio de Mello – Petroflex

Tecnoline Revestimentos Anticorrosivos - 1992

Dr. Walter Vila - <http://poliuretanos.com.br/>

COOPMACO