

() Graduação (X) Pós-Graduação

SUPERVISÓRIO EM LABVIEW PARA AUTOCLAVES DE SINTESE ORGÂNICA

Wagner Antonio Farias Doncev
UEMS- Universidade Estadual do Mato Grosso do Sul
mestre_alquimista@hotmail.com

Rogério Cesar de Lara da Silva
UEMS- Universidade Estadual do Mato Grosso do Sul
rcsilva@uems.br

RESUMO

Em sínteses orgânicas auto clavadas, realizadas com autoclaves de pequena escala (bancada) tendo como fonte calor o banho maria, atende perfeitamente a comprovação da formação do produto desejado, porém quando se deseja extrair outros dados, como consumo de calor cedido (em caloria, joule, watts e KWh), pressão interna em função da temperatura, pressão no decorrer da síntese, temperatura mínima para início da síntese, concentração da formação do produto, entre outros fatores, deixam a desejar por ser um vaso de reação primitivo. Por esses motivos, foi desenvolvido um autoclave digital capaz de monitorar todas as variantes químicas e físicas do processo de síntese por batelada através de sistema de automação e supervisório LabVIEW (Laboratory Virtual Instrument Engineering Workbench), na qual o mesmo, opera na plataforma Windows o qual faz a comunicação com um micro controlador Arduino. O aparelho completo é dividido em três grandes blocos estruturais para o funcionamento, sendo composto do vaso de reação, sistemas elétricos, sistemas, eletrônicos, sistemas de comandos, sensores e atuadores, e o software desenvolvido em linguagem booleana responsável em realizar o tratamento de dados e gerar a interface em diferentes grandezas físicas e químicas.

Palavras-chave: Autoclave; LabVIEW; Arduino; Supervisório.

1 INTRODUÇÃO

O software pode ser instalado em qualquer computador para se transformar em um elo entre o homem e o equipamento desenvolvido, possibilitando assim, uma visão geral da Interface homem máquina (IHM) gerada pelo diagrama de blocos, unidade de programação responsável pela Sistema de supervisor do vaso de reação (Figura 1). Nela, é possível observar as grandezas dos dados do consumo energético (ENG Automação, 2020) do calor cedido por batelada pelo resistor elétrico de liga de cromo níquel nas unidades de medida de calorías, joule, watts e KWh;(três indicadores no formato de galvanômetro expressam e controlam a pressão na unidade de Kgf/cm^2 (PROYECTO, 2020), a corrente elétrica na unidade de coulomb por segundo (ampère e a tensão elétrica em volts (MakerHero®, 2014), (Luis L, 2016).

No centro inferior, distribuído na forma horizontal da interface, aparece a janela do gráfico do espectrofotômetro regido pela lei de Lambert–Beer (Z. Marczenko, 1976), essa parte do softwares (Anjos; Galeazzo, 2023). E assim como o hardware instalado no corpo do autoclave, é responsável em monitorar a temperatura mínima em que se inicia a reação ao se incidir um feixe de laser monocromático no sentido transversal ao vaso de reação do aparelho.



Figura 1: Visão geral do sistema de interface homem máquina (IHM)

O hardware do espectrofotômetro é composto de um sensor Light Dependent Resistor (LDR) que possui a característica de ser um componente eletrônico cuja resistência elétrica diminui quando incide energia luminosa., obedecendo à equação $R = C.L^{-\alpha}$, onde L é a luminosidade em Lux, C e α são constantes dependentes do processo de fabricação e material

utilizado. Como mencionado anteriormente o LDR tem sua resistência diminuída ao ser iluminado. A energia luminosa desloca elétrons da camada de valência para a de condução (mais longe do núcleo), aumentando o número destes, diminuindo a resistência. Conforme aumenta a intensidade de luz incidente no LDR, um número maior de elétrons na estrutura tem também seu nível de energia aumentado, devido à aquisição da energia entregue pelos fótons. O resultado é o aumento de elétrons livres e elétrons fracamente presos ao núcleo. A Figura 2, a seguir mostra claramente o acoplamento do LDR no arduino de forma física (ATMEGA328P-DATASHEET, 2015). Na Figura 3, a representação eletrônica do acoplamento do sensor (LDR, 2020).

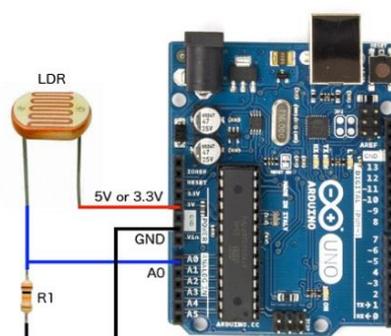


Figura 1: LDR acoplado ao arduino. Os fios preto (-) e vermelho (+) responsáveis pela alimentação, e o fio azul é responsável pela comunicação, fonte: LDR, 2020.

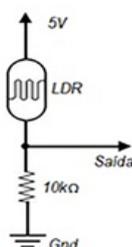


Figura 2: Esquema de projeto eletrônico do LDR, o GND é o polo negativo, a saída é o cabo de comunicação e o 5V é o polo positivo, fonte: Próprio autor.

2 DISCUSSÃO E ANÁLISE DOS DADOS

Transição da dispersão coloidal para solução em função da temperatura

A Figura 4, demonstra os dados da absorbância do monitoramento da reação entre os reagentes colocados no vaso de reação para a formação da 2-fenilacetamida em função do tempo de reação e temperatura (Integração de duas grandezas no eixo X) versus a transmitância (Eixo Y) no comprimento de onda de 540nm (correspondente a cor verde) de um LED dopado com fosfato de gálio. O software desenvolvido, monitora e controla a transmissão e recepção de feixe de fótons monocromático de cor verde que penetra e

atravessa o vaso de reação no sentido transversal. A onda eletromagnética, tem como objetivo, identificar o momento de transição da dispersão coloidal contida no vaso de reação em função da temperatura para solução. Os picos de valores acima de 650 % (valor da transmitância vezes 10) indicam o início da reação com os respectivos reagentes na forma de solução e na temperatura de 70°C. Os valores abaixo de 650 % (valor da transmitância vezes 10), indicam a formação de coloides. Na temperatura abaixo de 70°C, como consequência, ocorre o equilíbrio da reação.

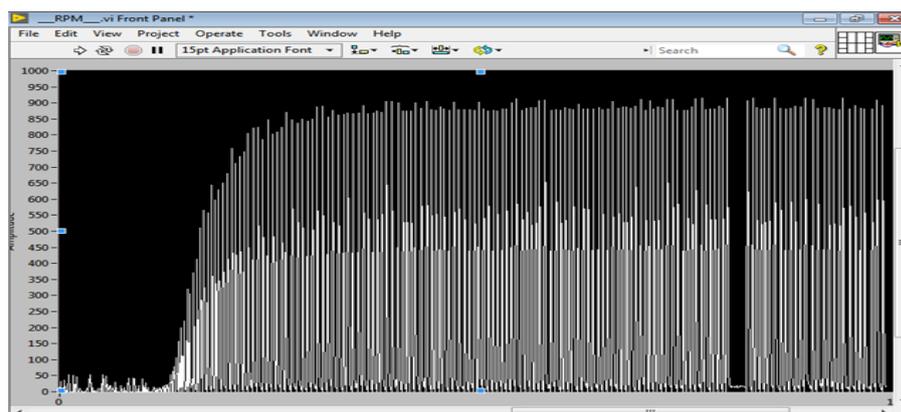


Figura 3: Gráfico de absorvância em função da temperatura na transição física dos reagentes.

Balço energético em função do rendimento da síntese da 2-fenilacetamida pelo processo de síntese de Willgerodt

Para a produção de 15,6g de 2-fenilacetamida a reação consumiu 11.74 kWh, o que equivale a 200W em 236h, sendo em Joules $4,2 \times 10^7$ J, ou ainda $1,0 \times 10^7$ Calorias. Para um total de 236 horas de síntese seria consumido 47.2 KWh. Entretanto, o sistema de supervisorío, controlou a temperatura, ou seja, o autoclave não ficou ligado por 236h. De posse dos dados fornecidos pelo sistema de supervisorío LabVIEW, é possível descobrir a quantidade de tempo que o autoclave ficou ligado no decorrer da síntese.

3 CONCLUSÕES

A abordagem proposta, desde a construção física do autoclave até o desenvolvimento do software de supervisorío em LabVIEW para sínteses autoclavadas demonstrou ser viável economicamente, tendo como referência o baixo custo de aquisição dos sensores e atuadores empregados no projeto. Outro fator relevante da construção do reator de bancada é a capacidade de monitoramento de pressão, temperatura, tensão, corrente, acompanhamento da formação dos produtos e monitoramento energético de calor cedido para cada batelada. O instrumento demonstrou eficiência, precisão e exatidão nos dados de acompanhamento de

reações orgânicas em bancada laboratorial para síntese da 2-fenilacetamida e intermediários.

AGRADECIMENTOS

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES), Código de Financiamento 001. Ao Programa Institucional de Bolsas para Alunos de Pós-graduação (PIBAP) da Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul (UEMS), ao Programa de pós-graduação em Recursos Naturais – PGRN-UEMS.

REFERÊNCIAS

ATMEGA328P-DATASHEET. 23 dez. 2015. Disponível em:

https://ww1.microchip.com/downloads/en/DeviceDoc/Atmel-7810-Automotive-Microcontrollers-ATmega328P_Datasheet.pdf. Acesso em: 23 dez. 2023.

LDR. Light Dependent Resistor With Arduino, 28/04/2020. Disponível em:

<https://www.c-sharpcorner.com/UploadFile/d15fb8/ldr-with-arduino/>
Acessado em: 05/12/2023

Luis L. Medir voltajes de hasta 25V con Arduino y FZ0430: Qué es el FZ0430. Website: 29 jun. 2016. Disponível em: <https://www.luisllamas.es/medir-voltajes-de-hasta-25v-con-arduino-y-fz0430/>. Acesso em: 21 dez. 2023.

ENG Automação. Medidor de Consumo. Voltímetro Wattímetro Digital 4x1. In.; 9 set. 2020. Disponível em: https://engautomacao.mercadoshops.com.br/MLB-803537936-medidor-de-consumo-voltimetro-wattimetro-digital-4x1-_JM. Acesso em: 22 dez. 2023.

PROYECTO. Medidor de presiones inalambrico. Fórum, 20 maio 2020. Disponível em: <https://forum.arduino.cc/t/proyecto-medidor-de-presiones-inalambrico/656690>. Acesso em: 21 dez. 2023.

Anjos, R, S.; Galeazzo, E. Introdução ao Ambiente de Programação LabVIEW. [S. l.]; 27 dez. 2023. Disponível em:

https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/5518293/mod_resource/content/3/TUTORIAL%20%20para%20o%20aluno%20ver%20em%20casa%20antes%20da%20exp1_atualizado%2020.pdf. Acesso em: 27 dez. 2023.

MakerHero®. Como medir corrente com Arduino: Medindo corrente e tensão., 28 out. 2014. Disponível em: <https://www.makerhero.com/blog/efeito-hall-acs714-corrente-com-arduino/>
Acesso em: 21 dez. 2023.

Z. Marczenko. Spectrophotometric determination of elements, Ellis Horwood, Chichester, 641 pp, 1976.