

Resinagem na indústria de rochas ornamentais: uma abordagem por modelagem molecular

Danielle da Silva Rosa
Alexandre Nelson M. Carauta
Júlio Cesar Guedes Correia

RESUMO

Atualmente do grupo das oleaginosas disponíveis, a mamona é uma das culturas mais versáteis e promissoras do ponto de vista industrial sendo submetido a diversos processos químicos, nos quais é possível obter uma enorme gama de produtos como na fabricação de plásticos, resinas, lubrificantes, cosméticos. O ácido ricinoléico ou óleo de mamona, como também é conhecido, é obtido da semente da planta e possui características químicas atípicas quando comparadas à maioria dos óleos vegetais. A resinagem em rochas ornamentais é um processo muito importante para a estruturação e beneficiamento da qualidade da chapa, além disso, a resina pode eliminar algumas imperfeições como rachaduras e trincas. A evolução dessas técnicas originou melhoria na qualidade do material e conseqüentemente uma maior valorização dos mesmos. Cálculos por mecânica e dinâmica molecular foram realizados com um programa computacional da estrutura do ácido ricinoléico para o estudo e a análise conformacional dos átomos constituintes, buscando prever as principais estruturas responsáveis pela interação do óleo com as rochas ornamentais no intuito de avaliar a viabilização da resina constituída de óleo de mamona no processo de resinagem.

Palavras-chave: Resinas. Óleo de Mamona. Modelagem Molecular.

INTRODUÇÃO

O óleo de rícino é obtido da semente de uma planta pertencente à família Euphorbiaceae, que tem o nome científico *Ricinus Communis*, mais conhecida como mamona (OGUNNINY, 2006).

Em razão de suas características de robustez e adaptabilidade, tem sido estudada e explorada para atender aos programas de produção de biocombustível e para fixar o homem no campo, principalmente no semiárido brasileiro. Em razão do grande número de variedades, os teores de óleo podem variar de 44 a 55% da massa de matéria seca das sementes. Para determinados fins, o óleo de mamona é quase insubstituível, sendo indicado para lubrificação de engrenagens sujeitas ao esfriamento e à ação da água, por aderir bem às superfícies molhadas, ao contrário dos demais óleos. (MACHADO 1998).

O óleo de mamona é obtido da semente da planta e possui características químicas atípicas quando comparadas à maioria dos óleos vegetais. Nos óleos vegetais, este está presente numa faixa de 84,0% a 91,0% da sua composição.

A estrutura molecular do triglicerídeo do ácido ricinoléico possui a particularidade de ser um dos poucos ácidos graxos naturais cuja estrutura química possui três grupos funcionais altamente reativos: o grupo carbonila no primeiro carbono, a dupla ligação ou insaturação, no 9º carbono e o grupo hidroxila no 12º carbono. Esses grupos funcionais fazem com que o óleo de mamona possa ser submetido a diversos processos químicos, nos quais é possível obter uma enorme gama de produtos. (CANGEMI, 2006).

O grupo hidroxila confere, a esse composto, estabilidade e alta viscosidade, que é permitida em largas faixas de temperatura, explicada pela formação de pontes de hidrogênio intermoleculares. (MULLER, 1978).

Este se solidifica em baixas temperaturas, e apresentam grande estabilidade oxidativa. O grupo hidroxila ainda apresenta uma propriedade exclusiva de solubilidade em álcool (WEISS, 1983; MOSHKIN, 1988).

Por ser um glicerídeo exclusivamente produzido pela natureza, solúvel em álcool; apresenta - se como um dos mais densos e viscosos de todos os óleos vegetais e animais. (BELTRÃO 2003)

Inúmeras são as aplicações deste óleo, podendo ser utilizado na fabricação de tintas, isolantes, lubrificantes aeronáuticos, manufaturados de cosméticos e entre outros. Além disso, o óleo de mamona pode ser utilizado em processos industriais, como na produção de corantes, anilinas, desinfetantes, germicidas, colas e aderentes, base para fungicidas e inseticidas, tintas de impressão e vernizes, além de nylon e matéria plástica, em que tem bastante importância. (COSTA 2004)

Por apresentar características físico-químicas definidas, é possível a criação de modelos capazes de prever suas estruturas, a fim de desenvolver novos materiais a partir de seu óleo vegetal. Entretanto, devido à complexidade da estrutura do óleo aliada à complexidade dos processos químicos envolvidos, se faz necessária a utilização de alguns modelos para a melhoria da descrição de suas propriedades, com o objetivo de diminuir a margem de erros. (SANTOS 2001)

A aplicação destes modelos teóricos tem como finalidade representar e manipular as estruturas das moléculas, além de estudar reações químicas e estabelecer relações entre suas estruturas e propriedades do material envolvido, estes formam o campo de atuação da modelagem molecular. Além disto, a química teórica ultrapassa estes parâmetros, tendo como função o desenvolvimento de novos modelos e suas ramificações dentro desta ampla área de atuação. (SANTOS 2001)

Pode-se dizer, de uma maneira geral, que todo tipo de estudo envolvendo a aplicação de modelos teóricos utilizando conceitos de átomo e molécula na descrição de estrutura e propriedades com objetivos em química caracteriza-se como modelagem molecular. (SANTOS 2001)

Esse trabalho tem como objetivo realizar uma análise conformacional por dinâmica molecular do ácido ricinoléico a fim de avaliar as posições relativas dos seus átomos constituintes buscando prever quais estruturas são as principais responsáveis pela interação dos óleos com os minerais constituintes das rochas ornamentais no intuito de avaliar a viabilidade de utilização do óleo de mamona na resinagem de rochas ornamentais em substituição as resinas epóxicas, normalmente utilizadas.

ÓLEO DE MAMONA

- um breve histórico sobre o óleo de mamona

A mamona é uma planta cientificamente denominada *Ricinus communis* L., da família Euphorbiáceas, e que, de acordo com alguns relatos, data-se de um período bem distante, em territórios asiáticos e africanos. Na Grécia, a mamona chegou a ser citada por alguns filósofos da época, mencionando que o óleo, em áreas do Egito, era utilizado com finalidades de iluminação e na produção de unguento, que para muitos era considerado um óleo milagroso.

No Brasil, a mamona é conhecida desde a época colonial quando extraía-se óleo a fim de lubrificar as engrenagens e os mancais dos inúmeros engenhos de cana. Foi trazida por portugueses para ser utilizada como lubrificantes de eixos de carroças. (CHIERICE E CLARO NETO, 2001).

A mamona pode ser encontrada praticamente em quase todo território brasileiro, e isto, deve-se ao fato do país apresentar um clima extremamente tropical, favorecendo seu cultivo. Atualmente o Brasil é um dos maiores produtores mundiais de mamona, perdendo para China e Índia. (ADITAL, 2009).



Figura 1 - Frutos da mamoneira (LEOALC, 2008).

- *Propriedades e características*

A mamona é uma planta que apresenta arbustos, coloração verde e folhas lobadas de formas variadas e seu fruto apresenta espinhos. Da semente extrai-se o óleo que responde pela maioria das aplicações da mamona.

A extração de óleos vegetais é um ramo fundamental da tecnologia de matéria prima graxa que apresenta como objetivo principal a obtenção do óleo com a permanência de suas características, além de obter um maior rendimento reacional com o mínimo de gastos no processo, seja ele de matérias-primas ou até mesmo energético.

O óleo de mamona representa aproximadamente a metade do valor total da semente, ele é obtido da semente da planta e possui características químicas atípicas quando comparadas à maioria dos óleos vegetais, Em sua composição, mais de 80% do triglicérideo é derivado do ácido ricinoléico que é um ácido graxo hidroxilado e pouco frequente.

Tabela 1 - Variação do teor de ácidos graxos no óleo.

Ácido Graxo	Percentual (%)
Ácido Ricinoléico	84,0 - 91,0
Ácido Linoléico	2,9 - 6,5
Ácido Oléico	3,1 - 5,9
Ácido Esteárico	1,4 - 2,1
Ácido Palmítico	0,9 - 1,5

A estrutura molecular do triglicérideo do ácido ricinoléico apresenta particularidade por ser um dos raros ácidos graxos encontrados na natureza cuja estrutura química possui três grupos funcionais altamente reativos: o grupo carbonila no primeiro carbono, a dupla ligação, ou insaturação, no 9º carbono e o grupo hidroxila no 12º carbono. Esses grupos funcionais fazem com que o óleo de mamona possa ser submetido a diversos processos químicos, nos quais é possível obter uma enorme gama de produtos.

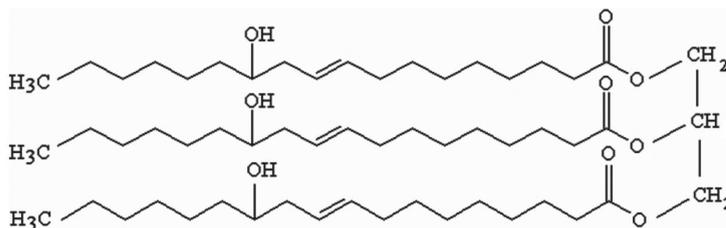


Figura 2 - Triglicérideo do ácido ricinoléico.

O grupo hidroxila confere, a este composto, maior estabilidade e viscosidade, que é percebida em largas faixas de temperatura devido à presença de interações intermoleculares do tipo ligação de hidrogênio. (MULLER, 1978).

Além de solidificarem em baixas temperaturas, possuem estabilidade oxidativa e solubilidade em compostos de álcool. (WEISS,1983: MOSHKIN, 1986)

Conforme BELTRÃO (2003), o ácido ricinoleico é o único glicerídeo natural capaz de se solubilizar em álcool, logo, representa um dos óleos vegetais mais densos e viscosos.

MODELAGEM MOLECULAR

- Conceito

O conceito de modelagem molecular baseia-se no modelo de construção e manipulação de modelos das estruturas com objetivo de entender o comportamento dos elementos representados. Além disso, consiste na formação e representação de estruturas moleculares a partir da utilização de softwares gerando os cálculos de suas propriedades físicas e químicas. A química quântica pode ser considerada a parte da mecânica quântica que estuda átomos e moléculas e fornece os fundamentos matemáticos utilizados pela modelagem molecular e a computação gráfica como ferramenta no trato dos modelos. (SANTOS 2001)

A modelagem molecular utiliza as expressões matemáticas com o objetivo de prever o comportamento das moléculas a partir do entendimento dos arranjos moleculares e seus movimentos. Também é possível prever as propriedades termodinâmicas, energias de ligação e compará-las com dados da literatura. (RODRIGUES, 2001).

Os programas de modelagem da atualidade são equipados de vários meios de construção, visualização, análise dos modelos de estruturas moleculares complexas com a finalidade de interpretar a propriedades eletrônicas, estabilidade, interações, e reatividade. A partir de algoritmos adequados que são capazes de calcular uma de energia de conformação específica e correlacioná-la com as propriedades termodinâmicas apresentadas pela substância. (COELHO 1998)

MÉTODOS CLÁSSICOS

- *Mecânica molecular*

A mecânica molecular é um método clássico da modelagem molecular que apesar de apresentar uma simplicidade computacional, oferece eficácia em seus resultados se for bem aplicada. A mecânica molecular (MM) é definida por um conjunto de métodos baseados em equações da mecânica clássica onde suas moléculas são vistas como um conjunto de átomos na forma de esferas que estariam “conectados” por um campo de força de valência, ou seja, a mecânica molecular trata os movimentos nucleares e não considera os elétrons diferentemente dos modelos quânticos. (SANT’ANNA, 2009)

Os métodos de mecânica molecular são de natureza empírica, sendo seus termos ajustados para reproduzirem parâmetros determinados experimentalmente. A mecânica molecular considera que a densidade eletrônica da molécula é ajustável e é alterada quando submetida a uma alteração de sua configuração geométrica dos núcleos, considerando que estes apresentem movimentos livres. (COELHO 1998)

Este modelo é muito utilizado com objetivo de modelar estruturas moleculares da bioquímica. Sua metodologia é estruturada na aproximação de Born-Oppenheimer, onde considera-se separadamente a movimentação dos núcleos e dos elétrons. (COELHO 1998)

A superfície de energia potencial também pode ser chamada de superfície de Born-Oppenheimer é capaz de descrever a energia da molécula em relação ao seu posicionamento nuclear. Como uma função matemática, a superfície apresenta mínimos locais no que se refere às conformações moleculares que se apresentam mais estáveis. (COELHO 1998)

A mecânica molecular é fundamentada em alguns parâmetros associados aos conjuntos de átomos que permanecem constantes entre diversas estruturas, caso os átomos apresentem o mesmo tipo de hibridação. Cada estrutura molecular apresenta valores tabelados na literatura de ângulos de ligação, ângulos de diedros, comprimento de ligação e todos eles são determinados experimentalmente. O conjunto destas funções é chamado de campo de força e este representa a energia potencial de cada geometria da estrutura molecular a partir de um sistema de coordenadas. (COELHO 1998)

Dentre as principais características atribuídas ao método de mecânica molecular seriam:

- A capacidade de descrever as forças intra e intermoleculares a partir de equações;

- A utilização do que é chamado de tratamento estatístico de otimização das posições dos átomos da molécula, onde os átomos são considerados esferas rígidas.

O processo de minimização de energia da estrutura molecular é utilizado com a finalidade de reduzir as “imperfeições”, ou seja alcançar uma energia mínima a partir de uma ferramenta matemática, ou seja, um algoritmo adequado. Para que isto ocorra utiliza-se um campo de força, formado por um conjunto de funções de energia, capaz de calcular toda a energia de uma molécula através da soma de suas contribuições energéticas. (SANT’ANNA, 2009)

Em termos matemáticos, a energia do campo de força é fornecida conforme a soma de termos que descrevem uma energia necessária para que ocorra a distorção necessária em uma molécula numa dada conformação. (FORESMAN & FRISCH, 1996). Essa expressão está representada pela equação a seguir:

$$E_{FF} = E_{str} + E_{bend} + E_{tors} + E_{vdw} + E_{el} + E_{cross} \quad (1)$$

Onde, cada termo representa:

E_{FF} = Energia de campo de força;

E_{str} = Energia de estiramento de uma ligação entre dois átomos;

E_{bend} = Energia da deformação angular;

E_{tors} = Energia de torção pra rotação em torno de um eixo;

E_{vdw} , E_{el} = Energia de interação de átomos não ligados;

E_{cross} = Energia que descreve as interações cruzadas.

Estes termos são representados na figura a seguir:

A cada etapa deste cálculo são medidas as distâncias, os ângulos de ligação, ângulos torsionais, interação de Van der Waals e interações eletrostáticas, e finalizando o cálculo, correlaciona-se estes dados com os dados da literatura com determinados experimentalmente.

Em um trabalho de modelagem, o que se considera são apenas as conformações de menor energia encontradas em um processo de minimização de energia de uma molécula.

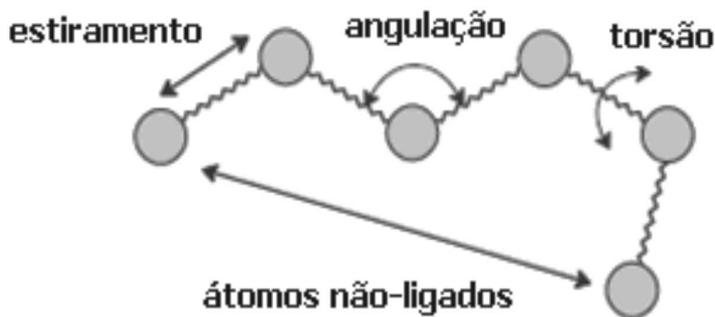


Figura 3 - Representação dos termos do campo de força (FORESMAN, FRISCH,1996).

Existem vários campos de força no mercado atualmente, diferindo principalmente quanto ao tipo de sistema, tipos de funções de energia que compõe o campo; alguns exemplos de campos de força são o AMBER, COMPASS, CHARMM, MM2, MM3, MM4.

Para prever uma geometria utilizando a mecânica molecular é necessária a escolha de um campo de força específico, logo ele se torna fundamental neste processo e é importante que ele esteja adequado para cada tipo de situação a ser analisada. Representa-se o campo de força em função das coordenadas nucleares, onde se fundamenta no elemento em questão e sua hibridização.

- Isomeria conformacional

A isomeria conformacional é definida como um arranjo espacial não idêntico de átomos em uma molécula resultante da rotação em torno de uma ou mais ligações simples.

Diversas conformações originam-se de rotações em torno dos átomos com no mínimo outro substituinte e a análise completa da área da superfície de energia potencial da molécula é o que se chama de análise conformacional.

Logo este método consiste na exploração dos vários arranjos espaciais e formas energeticamente favoráveis de uma molécula. Ela se utiliza da mecânica molecular, dinâmica molecular, cálculos químico-quânticos ou análise de dados estruturais determinados experimentalmente por RMN ou cristalografia de raios-X. (SANT'ANNA 2002.)

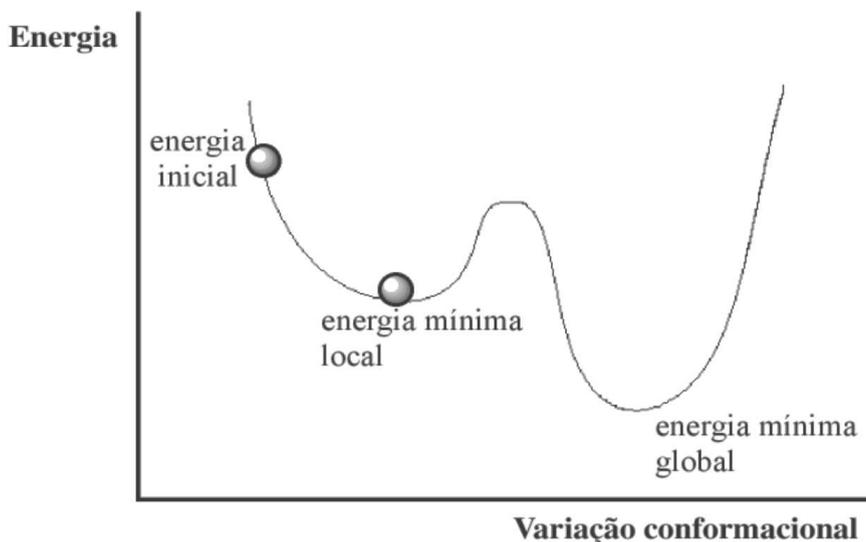


Gráfico 1 - Representativo do mínimo de energia local e global (Ivone Carvalho; Mônica T. Pupo; Áurea D. L. Borges; Lílian S. C. Bernardes. Introdução a modelagem molecular de fármacos no curso experimental de química farmacêutica. Quím. Nova, 26:3, 2003).

O gráfico acima descreve a Energia mínima local e global obtidas, respectivamente, pelo processo de minimização de energia. Portanto, conforme a rotação dos ângulos e diedros torcionais é possível obter o mínimo de energia local e global da molécula em estudo.

Os valores numéricos encontrados nas expressões matemáticas determinadas na função campo de força não apresenta um significado físico, porém, os valores relativos representam a energia conformacional. De acordo com as características do sistema e suas dimensões, a superfície pode apresentar um número elevado de mínimos locais de energia, como representado no gráfico a seguir.

- Dinâmica Molecular

A dinâmica molecular é um método da modelagem molecular capaz de propiciar informações relativas ao comportamento dinâmico microscópico, vinculado ao tempo, dos átomos individuais que compõem o sistema. (BURKERT & ALLINGER, 1982)

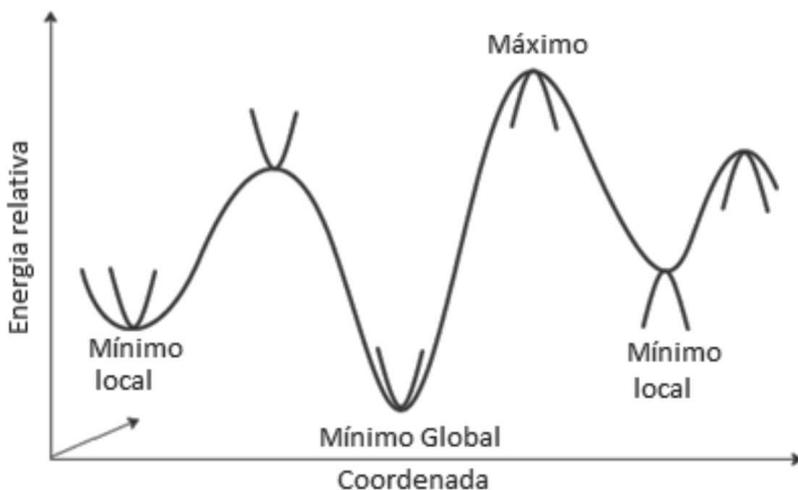


Gráfico 2 - Energia de superfície multi-dimensional (FORESMAN & FRISCH,1996).

Relacionando resultados da mecânica molecular, a dinâmica utiliza os conceitos de campo de força e solução das equações do movimento no tempo para obtenção de propriedades macroscópicas. A resolução das equações de movimento da dinâmica molecular representa a evolução no tempo dos movimentos moleculares, o que é chamado de trajetória, utilizado para o estudo de propriedades dependentes do tempo, tais como a difusão, o dobramento de cadeias moleculares a distribuição de moléculas de solvente ao redor de um soluto, entre outros. O cálculo de dinâmica molecular consiste na resposta da equação do movimento de Newton para cada átomo do sistema molecular.

Após definir o campo de força é possível calcular as forças interatômicas que atuam sobre cada átomo. O espaço de tempo que se utiliza na dinâmica possibilita a simulação dos movimentos de maiores frequências do sistema. Ele representa o espaço conformacional varrido pela simulação e seu valor varia de acordo com o sistema e restrições a ele impostas. (LEACH, 2001).

As propriedades a serem analisadas por meio das simulações da dinâmica seriam: a densidade, a viscosidade, a pressão de vapor, a conformação de micro e macromoléculas, as mudanças conformacionais em compostos, e várias outras.

As simulações se utilizam dos campos de força da mecânica molecular. Além disto, o processo das simulações necessita de parâmetros para que descreva as propriedades requeridas. Logo, para que se obtenha resultados precisos é essencial a parametrização, resultando dados superiores das propriedades comparadas àquelas obtidas experimentalmente.

METODOLOGIA

Todos os métodos utilizados na realização desse trabalho foram apoiados em metodologias aplicadas a sistemas similares, indicados nas referências bibliográficas. Este capítulo se divide basicamente em duas partes: A primeira, apresenta o procedimento de construção das estruturas básicas em estudo, utilizando o software *HyperChem 8.0*. Os descritores moleculares foram obtidos a partir de cálculos de Mecânica Molecular (MM+). As propriedades calculadas foram correlacionadas com os dados da literatura. Para a aplicação da metodologia, selecionou-se, da literatura, a molécula média do ácido ricinoléico.

- Modelagem da Estrutura

A construção das estruturas foi realizada no software *HyperChem 8.0*. As estruturas do ácido ricinoléico em análise foram desenhadas conforme representação proposta no artigo *Revolução Verde da Mamona* (2009). O procedimento de construção da molécula foi realizado manualmente no software, então no início do procedimento foram adicionados cada átomo para a formulação da molécula. Em seguida, realizaram as verificações das ligações, modificando-as se necessário. Posteriormente, adicionaram os hidrogênios, respeitando a valência de cada átomo. Finalizada a construção, a molécula foi submetida a uma rápida otimização de geometria.

- Energia de Estabilização

Usando a mecânica molecular, as moléculas construídas foram inicialmente submetidas à otimização para relaxação das estruturas. Em todas as simulações foi utilizado o campo de força MM+, após a obtenção da estrutura minimizada, foi realizada a dinâmica molecular por um tempo de 35 ps a fim de encontrar a melhor conformação espacial.

Essa análise foi obtida através do gráfico E (Kcal/mol) x número da estrutura, gerado pelo arquivo de cada estrutura que foi submetida à dinâmica. Através do mapeamento energético, foram descartados os primeiros 9 ps, considerados como tempo de relaxação do sistema e busca de equilíbrio termodinâmico.

Descartado esse tempo, os valores de energia foram organizados em ordem crescente para a seleção das estruturas mais estáveis. De acordo com o gráfico, esses valores possuem correspondência a um número da estrutura. Esse número foi posteriormente transcrito para verificação da conformação da estrutura. Os arquivos gerados foram armazenados. As estruturas mais estáveis foram novamente minimizadas por MM+.

A otimização seguiu o mesmo padrão das condições aplicadas inicialmente para cada estrutura e os valores das energias, obtidos pela segunda otimização, foram tabelados.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

De acordo com os procedimentos descritos na metodologia, representada abaixo apresenta os resultados encontrados da energia potencial que representa dos cinco confôrmeros de mais baixa energia obtidos pela dinâmica molecular após a última otimização da geometria.

Como dito anteriormente, a energia absoluta dessas conformações não tem sentido físico, então a tabela 2 mostra as energias relativas de cada confôrmero em relação à estrutura mais estável (Óleo DM C).

Tabela 2 - Energias relativas entre os confôrmeros.

Estruturas mais estáveis	ΔE(kcal/mol)
OLEO DM C	0,00
OLEO DM E	0,15
OLEO DM B	0,86
OLEO DM D	0,90
OLEO DM A	0,98

A área chamada de mínimo local corresponde ao ponto onde a força sobre o átomo do sistema encontra-se balanceada, estes são pontos estacionários da função da energia. Após minimizar o sistema, as estruturas passam por simulações da dinâmica molecular a fim de obter a melhor geometria da molécula que é especificada de acordo com as suas coordenadas atômicas. A minimização geralmente leva ao mínimo local mais próximo e não ao mínimo global representado na figura 4 abaixo.

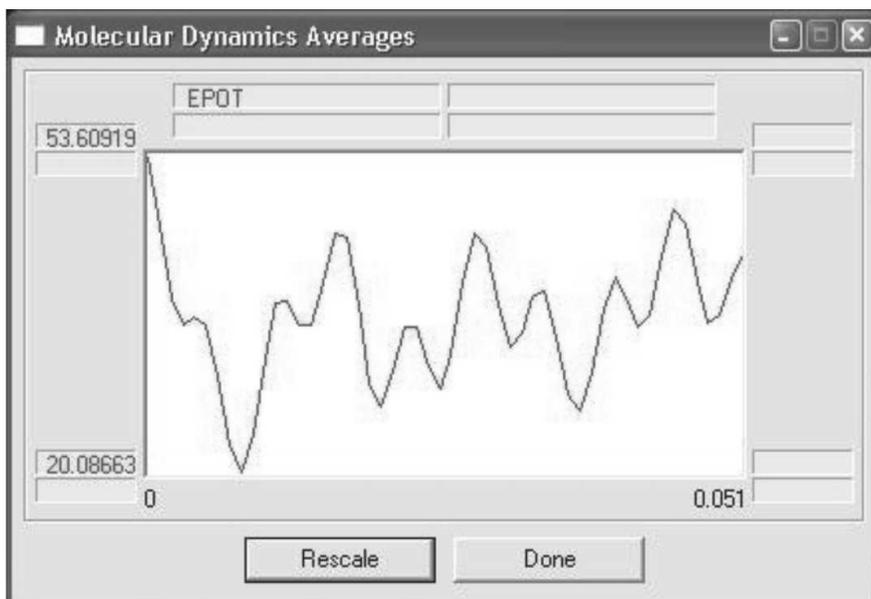


Figura 4 - Trajetória calculada pela dinâmica molecular (Energia Potencial X Tempo).

Em seguida os cálculos de dinâmica molecular simularam o movimento baseado em cálculos de energia potencial usando o campo de força (MM+) considerando cada átomo uma partícula. A dinâmica molecular foi capaz de ultrapassar as pequenas barreiras energéticas, sendo mais eficiente que a minimização simples na localização de um mínimo local mais profundo chegando à estrutura de mais baixa energia obtida representada na figura 5.

A análise conformacional de estruturas muito flexíveis é sempre complexa devido ao elevado grau de liberdade dos átomos na molécula,

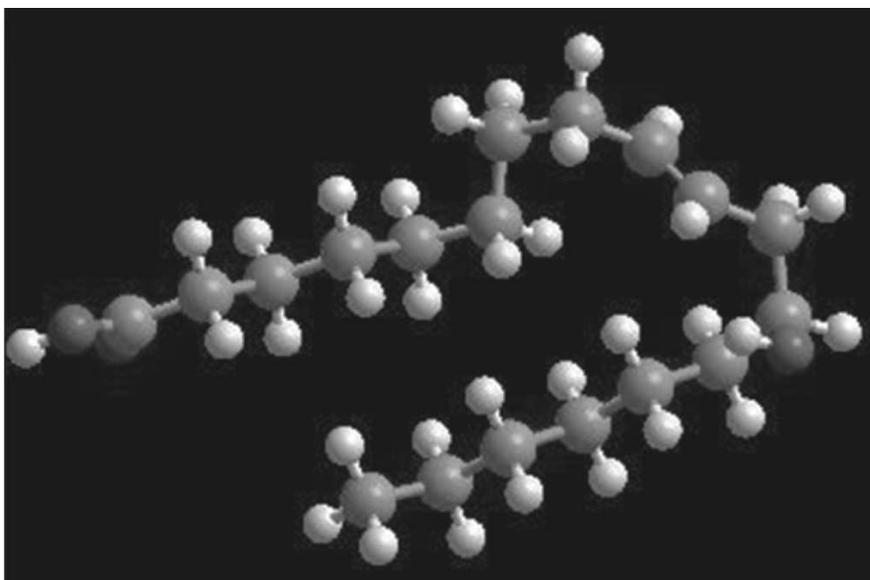


Figura 5 - Ácido ricinoléico de menor energia potencial.

por isso a opção por analisar apenas um ácido graxo ao invés do triglicerídeo completo se justifica. As figuras 6 e 7 mostram os cinco confôrmeros juntos com o objetivo de mostrar as diferenças conformacionais em detalhes a fim de identificar aquelas posições que estabilizam mais a estrutura. Da esquerda para a direita, temos as estruturas A, B, C, D e E, respectivamente. Pode-se notar que em todas as estruturas calculadas, a cadeia do ácido ricinoléico dobrou na posição do átomo de carbono que se liga a hidroxila no meio da cadeia, mostrando que essa conformação é mais estável do que a cadeia reta. No entanto, a alteração mais significativa e que provavelmente é a determinante para a diferença na estabilidade das estruturas, está na posição relativa do plano da carboxila em relação ao plano da cadeia carbônica na qual, este grupo funcional, está diretamente ligado. Na estrutura C, que é a de mais baixa energia, o plano da carboxila está paralelo ao plano da cadeia carbônica, enquanto nas demais estruturas esse plano da carboxila não se encontra paralelo em relação ao plano da cadeia carbônica. As demais diferenças conformacionais são típicas de rotações dos grupos $-CH_2-$ e normalmente não trazem diferenças energéticas substanciais em cadeias carbônicas longas.

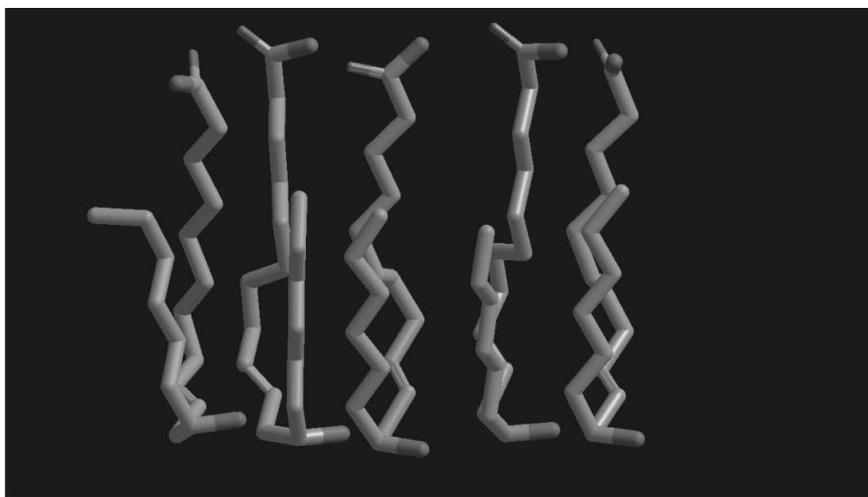


Figura 6 - As cinco estruturas mais estáveis do ácido ricinoléico. Da esquerda para a direita: estruturas A, B, C, D e E.

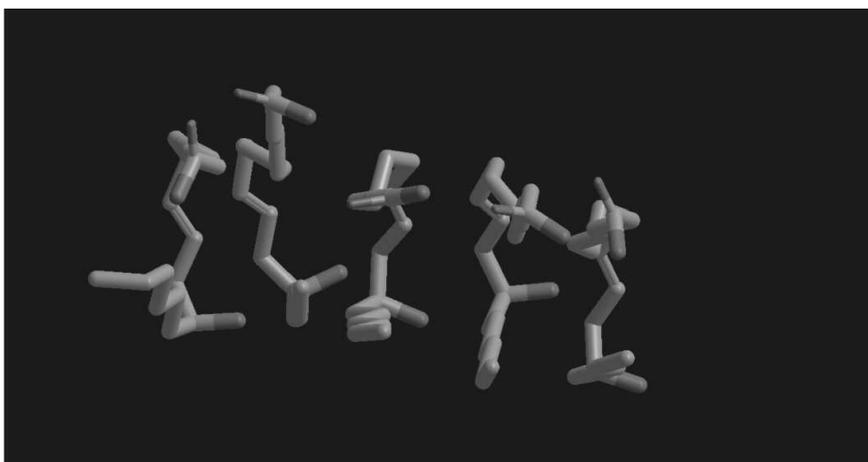


Figura 7 - As cinco estruturas mais estáveis do ácido ricinoléico. Da esquerda para a direita: estruturas A, B, C, D e E. Uma outra visão.

CONCLUSÃO

A utilização da mecânica e da dinâmica molecular permitiu a realização de uma análise conformacional do ácido ricinoléico e a obtenção da estrutura

mais estável para essa molécula, permitindo assim, conhecer a estereoquímica e a posição relativa dos átomos o que é de fundamental importância para estudar a interação desse composto com os minerais de interesse.

Embora os processos de mecânica e dinâmica molecular apresentem uma simplicidade nos cálculos, estes foram capazes de fornecer informações diretas nas pesquisas da análise conformacional e cumpriu o seu papel na determinação da geometria molecular do ácido ricinoleico chegando ao valor de energia específica.

É importante a escolha do melhor método de modelagem para um determinado problema, de forma que esta depende de três fatores principais: as quantidades que se deseja determinar, a precisão desejada e necessária e a capacidade de cálculo disponível.

REFERÊNCIAS

ADITAL, **Mamona, biocombustível e agricultura familiar no semiárido.** Disponível em: <<http://www.adital.org.br/site/noticia.asp?lang=PT&>. Acesso em 23 de junho de 2013.

BELTRÃO, N. E. de M.; **Informações sobre o Biodiesel, em especial feito com o óleo de mamona.** Campina Grande: EMBRAPA-CNPQ, Dezembro 2003, 3p. (Comunicado Técnico 177).

BURKERT, U.; ALLINGER, N. L. **Molecular Mechanics, ACS Monograph 177, American Chemical Society, Washington, D.C., 1982. 64-72 p.**

CANGEMI, J.M, **Biodegradação De Poliuretano Derivado Do Óleo De Mamona,** Tese De Doutorado - Instituto De Química De São Carlos, Universidade De São Paulo, São Carlos, 2006.

CANGEMI, J.M, DOS SANTOS, A. M, SALVADOR, C.N, **A revolução verde da Revolução Verde da Mamona,** Química Nova Escola, Vol. 32, Nº 1 , fevereiro 2010.

CHIERICE, G.O.; CLARO NETO, S. Aplicação industrial do óleo. In: AZEVEDO, D.M. P de; LIMA, E.F. (Org.) **O Agronegócio da mamona no Brasil.** Brasília: Embrapa Comunicação para transferência de tecnologias, (org.), p. 89- 120, 2001.

COELHO, L.W; JUNQUEIRA, G.M.A; HERRERA,J.O.M; MACHADO,S.P, **Aplicação De Mecânica Molecular Em Química Inorgânica**, Departamento de química Inorgânica, Instituto de química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, dezembro de 1998.

COSTA, H.M, RAMOS, D.V, THOMAS A. S. ABRANTES, DANIELE F. DE CASTRO, LEILA L. Y. VISCONTE, REGINA C. R. NUNES, CRISTINA R. G. FURTADO, **Efeito Do Óleo De Mamona Em Composições De Borracha Natural Contendo Sílica, Polímeros: Ciência E Tecnologia**, VOL. 14, Nº 1, P. 46-50, 2004.

FORESMAN, J. B.; FRISCH, E, **Exploring chemistry with electronic structure methods**, 2.ed. Pittsburgh, Gaussian, Inc. 1996.

LEACH, A. R. **Molecular modelling: Principles and Applications**. 1ed., Longman, Cingapura; Karplus & Petsko, Nature, 1998. 595 p.

MACHADO, C. C. ET AL. **Análise Técnico econômica do Uso dos Óleos de Mamona (*Ricinus communis*, L.) e mineral como lubrificantes do conjunto de corte de motosserras**. Revista *Árvore*, v.22, n.1, p.123-134, 1998.

MOSHKIN, V.A. CASTOR. **New Delhi: Amerind**, 1986. P. 65-92.

MULLER, H.G. **Introducción a la reología de los alimentos**. Editora Acribia, Zaragoza,1978. 174 p.

OGUNNINY D. S.; Castor oil: **A vital industria raw material** , Bioresource Technology, v. 97, 1086-1091, 2006.

RODRIGUES, C. R, **Modelagem Molecular**. Química Nova na Escola, Edição Especial, fevereiro de 2001, Universidade Federal de Minas Gerais.

SANT'ANNA, C. M. R.; *Quim. Nova* 2002, 25, 505.

SANTOS,F.H, **O conceito de Modelagem Molecular**, Cadernos Temáticos da Química Nova na Escola, Nº 4 – Maio 2001.

WEISS, E.A. CASTOR. IN: WEISS, E.A. (ORG.), **Oil seed Crops**. London: Longman, 1983. p. 31-99.