

Programa para a Modelagem da degradação de poliésteres biodegradáveis amorfos (Com a difusão de Cadeia pequena)

Esse programa tem como intuito realizar o calculo da Massa Molar de um poliester, no caso PLA, ao longo do tempo, considerando a difusão de cadeias pequenas.

Defnir Variaveis a serem utilizadas

```
global a GP m b k1 k2 n C0 Ce0 tf k2_ Rs0 t0 dt t1 t2 Rs1 Rs2 Mn1 Mn2 Mn X1 X2
```

Ler a entrada do Usuario

```
polimero = input('Qual polímero está sendo analisado? ', 's');
```

```
polimero =  
'PLA'
```

```
massa_molar_media = input('Qual é a massa molar média do polímero? ');  
tf = input('Quantas Semanas vão ser avaliadas? ');
```

```
tf = 25
```

Definir as Informações especificas de Cada Polimero

```
if strcmpi(polimero, 'PLA')  
    massa_molar_mere = 144.14; % Massa molar do mero do PLA (ácido láctico)  
    numero_ligacoes_ester = 1; % Número de ligações éster por mero do PLA  
    densidade_polimero = 1.24; % Densidade do PLA  
    k1 = 5E-4; % Constante de taxa de hidrólise para reação não catal.  
    k2_ = 0.0539; % Constante de taxa de hidrólise para reação autocatal.  
else  
    error('Polímero não suportado. Por favor, escolha PLA.');
```

```
end
```

Calcular o grau de Polimerizacao (GP)

```
GP = massa_molar_media/massa_molar_mere;
```

Calcular o numero total de ligações éster por unidade de volume (Ce0)

```
Ce0 = (densidade_polimero/massa_molar_mere)*numero_ligacoes_ester;  
Ccadeia = Ce0/GP; % Número de cadeias poliméricas por unidade de volume  
C0 = 0*Ce0; % Concentração inicial normalizada de grupos finais -C
```

Definir Constantes que serão utilizadas para o integrador do Matlab

```

n = 0.5; % Expoente de dissociação ácida de grupos -COOH
k2 = (Ce0^n)*k2_; % Constante de taxa de hidrólise para reação autocatal.
m = 4; % DP médio das cadeias curtas; adimensional
a = 0.4; % Parâmetros empíricos para produção de cadeia curta
b = 1; % parâmetros empíricos para produção de cadeia curta
X1 = 0; % Parâmetros de particionamento para as cadeias longas
X2 = 1; % Parâmetros de particionamento para as cadeias curtas

```

Chamar o Integrador e Calcular a Taxa de dissociação e Massa Molar

```

Rs0 = 0; % Numero de cadeias quebradas no inicio
t0 = 0; % Tempo inicial
dt = 1; % Passo de integração

```

Integrador do Matlab

```
[t1,Rs1]=ode45(@calc_f_Rs_av, [t0 tf], Rs0);
```

Calcular Massa Molar

```
Mn1 = (1 - a*Rs1.^b)./(1+GP.*(Rs1 - (a/m)*Rs1.^b)); % Massa Molar Com Exclusao de Cadeias Longas
```

Plotar

```

hold on
plot(t1,Mn1,'Color', 'r', 'LineStyle', '--', 'Marker', 'none');
title 'Massa Molar';
xlabel('Tempo (Semanas)');
ylabel('Massa Molar Média Normalizada');
legend('ODE45');
hold off

```

