

aplicação na indústria em sistemas que necessitem recobrimentos protetores de alta dureza e baixo desgaste.

689

### **Dendrímeros de silsesquioxanos e octaminopolipropilenoímina modificados com triclorotriazina: síntese, caracterização e aplicações**

Devaney Ribeiro do Carmo  
Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira  
Universidade Estadual Paulista (Unesp)  
Processo 2003/12882-6  
Vigência: 1/8/2004 a 30/4/2008

O presente projeto tem como principal escopo preparar e caracterizar dendrímeros de silsesquioxano [ $H_2N(CH_2)_3$ ] $8SiO_{12}$  (DS) e octaminopolipropilenoímina (DPPI). As cadeias periféricas dos dendrímeros (DS) e (DPPI) serão modificadas com triclorotriazina formando DST e DPPIT. Os dendrímeros modificados serão caracterizados por meio de técnicas espectroscópicas. A segunda etapa é estender as reações dos dendrímeros modificados, com substâncias eletroativas (azul de metileno, azul de ortotoluidina). Os dendrímeros modificados serão testados nas oxidações eletrocatalíticas de NADH, hidrazina, ácido L-ascórbico, cisteína, cistina, nitrito, para montagem de um sistema eletroanalítico na determinação dessas substâncias em amostras biológicas e fármacos. Outra aplicação está na verificação da capacidade desses dendrímeros em encurtar a ação farmacológica do naloxonazina e norbinaltorfimina (receptores opioides) e também de drogas antineoplásicas. Em uma etapa posterior, deseja-se imobilizar os dendrímeros modificados acima descritos (DST e DPPIT) em uma sílica modificada com aminopropiltriétoxissilano. O material obtido será aplicado na remoção de metais em solução aquosa e/ou orgânica e posteriormente testado na remoção de  $Cu_2^+$ ,  $Ni_2^+$ ,  $Zn_2^+$  em amostras reais (álcool combustível) empregando uma coluna cromatográfica.

690

### **Modelagem matemática da solidificação de ligas binárias sob efeito de convecção natural no líquido e movimentação da fase sólida**

Marcelo de Aquino Martorano  
Escola Politécnica  
Universidade de São Paulo (USP)  
Processo 2003/08576-7  
Vigência: 1/1/2005 a 28/2/2010

Nas últimas décadas, diversos modelos matemáticos têm sido desenvolvidos para a previsão da formação da macrossegregação e da macroestrutura dendrítica durante

a solidificação de ligas metálicas. No entanto, atualmente, há poucos modelos que consideram simultaneamente os efeitos da movimentação da fase líquida e sólida (dendritas equiaxiais) na solidificação, apesar de existirem evidências experimentais indiscutíveis da importância desses efeitos. Entre os modelos que consideram a movimentação das fases líquida e sólida do sistema, nenhum trata simultaneamente do crescimento colunar e equiaxial, ou mesmo da transição colunar-equiaxial. Além disso, a nucleação, que possui um papel fundamental nessa transição, é geralmente abordada pelo modelo mais simples possível (nucleação instantânea). O presente projeto de pesquisa tem, como um de seus objetivos, o desenvolvimento de um modelo matemático para a previsão da macrossegregação, da distribuição de tamanhos de grão equiaxial e da transição colunar-equiaxial em situações de crescimento isotérmico, unidirecional e bidirecional na solidificação de ligas metálicas. Este modelo deverá considerar: 1) a nucleação dos grãos equiaxiais em diferentes tipos de substratos; 2) o crescimento equiaxial e colunar; 3) a transição colunar-equiaxial; 4) a convecção natural do líquido movida por gradientes de temperatura e concentração; e 5) a movimentação das dendritas equiaxiais. Como também foi observado na literatura que a validação experimental do tipo de modelo desenvolvido é muito limitada, outro objetivo do presente projeto envolve a validação experimental do modelo construído em diversos experimentos de solidificação isotérmica e unidirecional. Espera-se com os resultados do projeto melhorar o entendimento de como a convecção natural do líquido e a movimentação das dendritas equiaxiais afetam a macrossegregação e a macroestrutura bruta de solidificação.

691

### **Caracterização de borrachas desvulcanizadas por micro-ondas e sua incorporação em termoplásticos**

Carlos Henrique Scuracchio  
Escola de Engenharia de Lorena  
Universidade de São Paulo (USP)  
Processo 2003/08175-2  
Vigência: 1/1/2004 a 31/12/2006

O projeto de pesquisa proposto vem ao encontro a dois desafios que o Brasil e, em especial, o Estado de São Paulo têm em termos ambientais: 1) estudar com profundidade uma forma de reutilização de borrachas vulcanizadas; 2) desenvolver materiais com propriedades competitivas a partir dessas borrachas recicladas, possibilitando que sua reinserção no mercado seja tecnológica e economicamente viável. Comparando-se com a reciclagem de outros materiais, por exemplo, termoplásticos ou metais, a reciclagem de borrachas vulcanizadas tem a desvantagem de que estas se constituem de materiais termorrígidos, ou seja, que apresentam ligações cruzadas entre as

cadeias que impossibilitam sua fusão e remoldagem em novos formatos, a não ser que um processo de quebra dessas ligações cruzadas seja utilizado. Esse processo de quebra das ligações cruzadas é chamado de desvulcanização. Existem várias técnicas de desvulcanização descritas na literatura. No caso do presente projeto de pesquisa, será utilizada a desvulcanização por meio de micro-ondas, por ser um dos processos mais promissores em termos de custos e resultados. É importante ressaltar que, apesar da possibilidade de fluírem e de serem moldadas, as borrachas desvulcanizadas em geral têm propriedades completamente diferentes de borrachas virgens. Estas propriedades serão em grande parte resultado dos processos de vulcanização e de desvulcanização utilizados. Portanto, será necessário que se faça a caracterização do material desvulcanizado obtido e um mapeamento das influências que os parâmetros do processo de desvulcanização terão nas propriedades desse material. Os parâmetros de processo serão principalmente a potência das micro-ondas e o tempo de exposição do material. Somente tendo essas informações será possível escolher as melhores condições do processo de desvulcanização para uma determinada aplicação. Após a desvulcanização, é necessário decidir como a borracha será reutilizada. Neste projeto, decidiu-se pelo uso desses materiais em blendas com termoplásticos virgens, visando à diminuição do custo desses termoplásticos e ao mesmo tempo, melhorando algumas de suas propriedades, como resistência ao impacto e obtenção de elastômeros termoplásticos do tipo termoplástico vulcanizado (TPV). Essa etapa também exige um trabalho de caracterização detalhado, já que as propriedades dos termoplásticos, da borracha desvulcanizada e as condições de processamento e mistura terão uma influência decisiva na morfologia da blenda polimérica resultante e, portanto, de suas propriedades mecânicas finais. Portanto, os principais objetivos do presente projeto são: 1) fazer um estudo completo das propriedades das borrachas recicladas e desvulcanizadas pelo método de micro-ondas. Essa caracterização inclui não só a determinação das propriedades físicas e químicas desse material como também o estudo sistemático do processo de desvulcanização em si e de como as variáveis desse processo de desvulcanização irão influenciar as propriedades das borrachas desvulcanizadas. Como elastômeros, em geral, são utilizados misturados com cargas minerais, os efeitos dessas cargas no processo de desvulcanização também serão avaliados; 2) estudar a incorporação das borrachas desvulcanizadas por micro-ondas em termoplásticos, visando à obtenção tanto de elastômeros termoplásticos do tipo termoplástico vulcanizado, TPV, quanto a tenacificação de termoplásticos tipicamente frágeis. Essa etapa tem uma estreita relação com a primeira, já que será preciso encontrar as condições de desvulcanização que gerem um material com boas propriedades para incorporação com o termoplástico. Para a execução do trabalho serão utilizados tanto materiais com

composição controlada, ou seja, borrachas misturadas e vulcanizadas pelo próprio grupo de pesquisa, como rejeitos industriais da indústria de borracha.

692

### Filmes finos e espessos de materiais eletrocêramicos do sistema $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO-(TaxNb}_{1-x}\text{)}_2\text{O}_5$ preparados por método químico e síntese mecanoquímica

Sonia Maria Zanetti

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (Inpe)

Ministério da Ciência e Tecnologia

Processo 2002/09497-0

Vigência: 1/7/2003 a 30/6/2007

Este trabalho tem por objetivo preparar e caracterizar filmes cerâmicos finos e espessos com propriedades dielétricas por método químico e por síntese mecanoquímica. Os filmes serão preparados pela deposição por *spin coating* sobre o substrato condutor elétrico seguido de tratamento térmico para a obtenção da fase cristalina. Em uma primeira etapa, pretende-se explorar a síntese por solução química, em particular utilizando-se o método dos precursores poliméricos. Os filmes finos serão preparados pela deposição direta da resina obtida, após o ajuste da viscosidade. Os pós cerâmicos serão produzidos pela pirólise da resina polimérica e posterior calcinação, de forma a se obter a cristalização da fase desejada. Os filmes espessos serão obtidos pela deposição da suspensão formada pela dispersão desses pós. Na etapa posterior, pretende-se obter pós cerâmicos por síntese mecanoquímica, por ativação mecânica dos reagentes óxidos que constituem o material. Nesse caso, os óxidos são misturados e submetidos à moagem em moinho vibratório em alta rotação. A energia transferida ao material leva à cristalização da fase em temperaturas mais baixas, além de proporcionar pós com tamanho de partículas submicrométricos. Pelo controle da concentração da dispersão desses pós, serão depositados os filmes finos (dispersão mais diluída) e espessos (dispersão mais concentrada). Pretende-se estudar o sistema  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO-(TaxNb}_{1-x}\text{)}_2\text{O}_5$  ( $x = 0; 0,25; 0,50; 0,75$  e  $1$ ) puro (BZTN) e dopado (BZTNM, M = dopante), devido ao grande potencial desse material em aplicações como termistores (dielétricos de temperatura estável e de compensação de temperatura), capacitores de multicamadas e ressoadores cerâmicos, para utilização em telecomunicações. A grande vantagem do sistema BZTN em relação aos demais materiais dielétricos é requerer temperatura de sinterização relativamente baixa ( $1.000^\circ\text{C}$ ) e também por ser um material livre de chumbo.

693

### Estudos de materiais cerâmicos para energia limpa: dispositivos fotoeletroquímicos e baterias de íons lítio