



## FEIRA DE INOVAÇÃO TECNOLÓGICA VI FINOVA

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: FEIRA DE INOVAÇÃO TECNOLÓGICA DA UFRGS - FINOVA
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	PREDIÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE NANOCOMPÓSITOS ASSISTIDA POR SOFTWARE
<b>Autor</b>	GUILHERME RIBEIRO RODRIGUES
<b>Orientador</b>	SANDRO CAMPOS AMICO

## **PREDIÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE NANOCOMPÓSITOS ASSISTIDA POR SOFTWARE**

Materiais compósitos são definidos por Daniel e Ishai como sendo um sistema material que consiste de duas ou mais fases macroscópicas, cuja performance mecânica e propriedades são projetadas para serem superiores àquelas dos materiais constituintes agindo isoladamente.

Esta classe de material vem conquistando cada vez mais espaço na indústria brasileira e mundial. No mercado norte-americano, por exemplo, seu uso vem crescendo a uma taxa constante de 10% ao ano.

Materiais compósitos poliméricos consistem de resinas poliméricas, como epóxi ou poliéster reforçados comumente por fibras sintéticas, como carbono e vidro, fibras naturais, como coco e curauá, ou partículas, como carbonato de cálcio. Porém, em 1990 Usuki produziu os primeiros compósitos cujo reforço foi dispersado em escala nanométrica, interagindo com a matriz através de ligações, causando um aumento significativo nas propriedades mecânicas do material, com pequenas quantidades de até 5% de fração volumétrica de nanocarga. Um palete de silicato de argila mineral por exemplo, possui 1 nm de espessura e largura de até 100 nm, uma elevada razão de aspecto que favorece sua impregnação. Além de argila, outros reforços comumente aplicados em nanocompósitos são nanotubos de carbono, um material cujo módulo de elasticidade pode ultrapassar 1 TP, que além de melhora nas propriedades mecânicas também favorece as propriedades térmicas e elétricas do compósito.

Existem hoje diversos softwares capazes de realizar a predição das propriedades mecânicas de materiais compósitos reforçados por fibras utilizando teorias da micromecânica, no entanto nenhum deles está em português, sendo a maioria deles caros, mesmo para licenças acadêmicas.

O software MECH-Gcomp entretanto, disponibiliza de forma gratuita, mediante cadastro prévio, a possibilidade de calcular propriedades mecânicas não apenas de compósitos reforçados por fibras, mas também por partículas e nanocargas, sendo o primeiro software a possuir um módulo destinado a nanocompósitos. Propriedades como módulo de elasticidade e módulo de cisalhamento podem ser rapidamente calculadas a partir da inserção das propriedades da matriz polimérica e da nanocarga individualmente, a partir de equações pesquisadas na literatura. Também está disponível em dois idiomas - inglês e português. Ambos abrangem totalmente o sistema e podem ser alterados conforme a preferência do usuário.

Os resultados dos cálculos efetuados pelo MECH-Gcomp podem ser exportados em tabelas .XLS, a fim de serem facilmente consultados posteriormente. Outra funcionalidade inclui a geração de gráficos e exportação destes em formato .PNG. Estes demonstram a influência de determinada propriedade conforme é variada a fração volumétrica do reforço, dispensando assim ensaios experimentais para sua predição.

Dentro do MECH-Gcomp, o módulo de nanocompósitos é dividido de acordo com a natureza do reforço, possuindo modelos específicos para argila e carbono.

Em um estudo desenvolvido no Laboratório de Polímeros da UFRGS, amostras de poliéster reforçadas com partículas de argila de diâmetro aproximado de 1,17 nm foram testadas e tiveram seu módulo de elasticidade e cisalhamento medidos experimentalmente. Quando confrontadas com o resultado dos ensaios, as previsões efetuadas pelo *software* mostraram grande coerência, considerando a imprecisão nas propriedades dos constituintes.

Recentemente, o software adquiriu um registro de programa de computador junto ao Instituto Nacional de Propriedade Industrial e vem sendo divulgado e utilizado em congressos, palestras e cursos em universidades e brasileiras.

O MECH-Gcomp está presente nos principais sistemas operacionais como uma plataforma Web. Ao longo do desenvolvimento do software fez-se uso de diversas tecnologias. Entre elas as linguagens de programação JavaScript e Python, com frameworks e bibliotecas especializadas em desenvolvimento de páginas Web, como Django e JQuery.

Para a plotagem dos gráficos utilizou-se o script html2canvas, para a exportação de tabelas, empregou-se a biblioteca xlwt. Num âmbito geral, foram também utilizados HTML5 e CSS, linguagens de marcação e formatação. A tradução foi feita com auxílio da Rosetta, uma aplicação do Django destinada a mecanismos de internacionalização (i18n). Todas estas foram empregadas dentro do ambiente Eclipse de desenvolvimento. As informações de partículas, fibras e nanocargas são mantidas em um banco de dados do tipo SQL, gerenciado pela ferramenta MySQL Workbench.