

Doutorado

CARBETO DE MOLIBDÊNIO E DE PALÁDIO-MOLIBDÊNIO EM ZEÓLITA Y COMO CATALISADOR NA REAÇÃO DE ACOPLAMENTO NÃO OXIDATIVO DE METANO

Autora: *Cristina Rocha de Almeida Hamelmann*

Orientadores: *Victor Luis dos Santos Teixeira da Silva e Eduardo Falabella Sousa-Aguiar*

Curso: *Química*

Tese defendida no IME, em 10/05/06

Nesse trabalho foi avaliada a possibilidade de obtenção de hidrocarbonetos alifáticos com a utilização do catalisador Mo/USY na reação de acoplamento não-oxidativo do metano. Os catalisadores na fase óxido, preparados por impregnação, foram caracterizados por espectroscopia no UV-visível e apresentaram espécies de Mo, predominantemente, monoméricas em coordenação tetraédrica, independentemente do teor de Mo e do pH da solução do sal precursor. Foi observada forte interação das espécies de Mo com a zeólita, evidenciada pela intensa redução da área específica BET, da microporosidade, além de um decréscimo, não homogêneo, da intensidade dos picos de DRX com o aumento do teor de Mo. Esse comportamento, associado ao aparecimento de bandas de absorção no infravermelho indicativas de espécies de alumínio extra-rede sugere a perda de cristalinidade da zeólita. A introdução de Mo acarretou um decréscimo da concentração dos sítios ácidos de Bronsted dos catalisadores.

Na carburação das amostras Mo/USY com mistura 20%CH₄/H₂ com programação de temperatura e acompanhamento dos sinais de formação de H₂O e CO por espectrômetro de massas, foi observado um pico largo de formação de H₂O, evidenciando forte interação Mo-zeólita. Essa interação acarretou o deslocamento da etapa de redução para temperaturas maiores e, em consequência, também, da etapa de carburação. Os catalisadores Mo₂C/USY apresentaram alta conversão de metano nos instantes iniciais da reação, com formação de benzeno e naftaleno em quantidades quase equimoleculares seguida de seletividade a naftaleno quase total. A formação de coque foi bastante severa e, provavelmente, responsável pela desativação dos catalisadores. A quantidade de coque sobre os catalisadores apresentou uma correlação direta com a concentração de sítios ácidos de Bronsted, o que sugere ser o coque de natureza poliaromática. A utilização de Pd como promotor foi avaliada como possibilidade de redução da quantidade de coque formado, devido às suas propriedades hidrogenantes. Tal comportamento não foi observado, sendo a quantidade de coque ainda maior com a introdução do Pd. Zeólitas USY com diferentes valores de SAR foram, também, avaliadas, apresentando maior estabilidade, mas sem alteração do perfil de formação de produtos. A zeólita USY não se mostrou um bom suporte para o sistema estudado, a formação de coque foi bastante intensa, com perfil de formação de produtos similar à reação homogênea não catalisada. Para a reação de acoplamento do metano há necessidade de um catalisador bifuncional que, além de ser capaz de ativar o metano, seja capaz de direcionar a etapa de crescimento de cadeia.

Mestrado

DESEMPENHO DE ALGORITMOS PARA ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS DE SINCRONIZAÇÃO EM SISTEMAS OFDM

Curso: Engenharia Elétrica

Autor: João Terência Dias

Orientador: Prof. Ernesto Leite Pinto

Tese defendida no IME, em 03/04/06

Ao longo dos últimos anos a técnica OFDM (*Orthogonal Frequency Division Multiplexing*) tem despertado o interesse de diferentes grupos de pesquisa em todo o mundo, devido às suas potenciais vantagens para aplicação a canais seletivos em frequência, como é o caso típico dos canais em sistemas de comunicações móveis. No entanto, essa técnica reconhecidamente apresenta grande sensibilidade a erros na estimação de parâmetros de sincronização, tais como o desvio de frequência entre transmissor e receptor e o instante de início dos símbolos OFDM. Esta sensibilidade merece maior atenção ainda quando se trata de cenários de comunicações móveis. Por essa razão, diversos trabalhos de pesquisa recentes têm proposto técnicas de estimação destes parâmetros.

O presente trabalho é dedicado à avaliação de desempenho de diversas destas técnicas através de simulação em computador, além de propor uma modificação em uma delas. O desempenho das técnicas é avaliado através da média e do erro médio quadrático dos estimadores. Além disso, também se avalia o efeito da aplicação dos métodos em questão sobre o desempenho de taxa de erros de *bit* do receptor. No que diz respeito

à modelagem de canal, considera-se o modelo AWGN (*Additive White Gaussian Noise*) e um modelo particular de canal WSSUS (*Wide Sense Stationary Uncorrelated Scattering Channel*) que tem sido usado em alguns trabalhos internacionais para avaliação de desempenho da transmissão digital de vídeo em sistemas de comunicações móveis. Neste segundo caso, diferentes condições de transmissão são consideradas, particularmente no que diz respeito ao espalhamento em frequência. O trabalho ainda inclui uma comparação destas técnicas em termos de complexidade computacional.

Os resultados apresentados no trabalho evidenciam significativas diferenças de desempenho entre as técnicas, bem como importantes diferenças no que diz respeito à robustez, às condições de transmissão. Estes resultados também mostram que a modificação proposta em um dos métodos de estimação produz significativas melhorias de desempenho em relação ao método original, a um custo computacional atraente.

ENGENHARIA DE TRÁFEGO EM REDES IP

Autor: Vitor Guerra Rolla

Orientador: Ronaldo Moreira Salles

Curso: Sistemas e Computação

Tese defendida no IME, em 05/04/06

Este trabalho apresenta uma abordagem alternativa para o problema do roteamento ótimo de menor caminho e propõe um conjunto de novos algoritmos para a resolução do problema. Tais algoritmos constituem um pacote (caixa de ferramentas) para o apoio às operações de engenharia de tráfego em redes IP. Em termos gerais, uma solução para o roteamento ótimo de menor caminho determina quais são os pesos ideais para os

enlaces da rede de forma que protocolos de roteamento tradicionais (p.ex.OSPF) possam otimizar a distribuição do tráfego na rede. Foram considerados os objetivos principais da engenharia de tráfego: balanceamento de carga, otimização do uso dos recursos da rede e tolerância a demandas crescentes de tráfego. Resultados numéricos mostraram um desempenho bastante significativo para os algoritmos propostos.

VARIÁVEIS TÁTEIS PARA REPRESENTAÇÕES CARTOGRÁFICAS

Autor: Diogo dos Santos Adelino

Orientador: Prof. Dr. Luiz Felipe Coutinho Ferreira da Silva

Curso: Engenharia Cartográfica

Tese defendida no IME, em 06/04/06

A Cartografia utiliza a visualização como forma de transmissão das informações contidas em seus documentos, trazendo como conseqüências não só a segregação de um segmento da população, os deficientes visuais, mas também limitando as formas de representação. Dessa forma, o presente trabalho apresenta uma proposta de variáveis táteis a partir das variáveis visuais de Bertin e suas respectivas extensões definidas através de testes de percepção háptica. Esta proposta tem como objetivo a determinação de um conjunto de variáveis que sirva de base para a construção de documentos cartográficos táteis e, assim, contribuir para a geração de mapas mais eficazes no que concerne a comunicação cartográfica, através da sistematização da construção de simbologia tátil.

Para a determinação do conjunto destas variáveis, foram realizados levantamentos bibliográficos sobre os temas relacionados, uma discussão conceitual sobre as variáveis visuais e

a elaboração de um conjunto de testes de validação. Os testes realizados com os deficientes visuais permitiram avaliar a percepção das variáveis táteis e suas extensões, determinando quais são possíveis de serem implementadas em documentos cartográficos que utilizem o tato para a leitura e interpretação das informações cartográficas contidas. Além disso, indicaram as deficiências a serem corrigidas e as limitações da percepção tátil a serem levadas em consideração na construção de mapas táteis.

Dessa forma, espera-se que este trabalho contribua não só para o aperfeiçoamento dos documentos cartográficos, mas também para a melhora da qualidade de vida dos deficientes visuais, bem como o desenvolvimento da ciência cartográfica.

DESENVOLVIMENTO DE UMA BARREIRA FÍSICA DE POLI(TETRAFLÚOR-ETILENO) PARA APLICAÇÃO EM REGENERAÇÃO ÓSSEA GUIADA EM IMPLANTODONTIA

Autor: Osmar Chaves Barreto

Orientador: Carlos Nelson Elias

Co-orientador: Luís Cláudio Mendes

Curso: Ciência dos Materiais

Tese defendida no IME, em 24/04/06

Um dos grandes problemas encontrados na Odontologia é o tratamento de defeitos ósseos. Vários trabalhos têm sido realizados com o objetivo de desenvolver técnicas cirúrgicas e melhorar a qualidade dos biomateriais que auxiliam na regeneração do tecido ósseo danificado ou que possam ser usados na substituição do mesmo. Para otimizar a regeneração são utilizadas membranas que servem como barreiras biológicas. Essas membranas controlam a

competição de diferenciação do tecido conjuntivo frouxo e o tecido epitelial em relação ao tecido ósseo. A exclusão dos tecidos indesejáveis da região onde se deseja formar um tecido específico é o princípio básico da regeneração tecidual guiada.

O poli(tetraflúor-etileno) (PTFE), comercialmente conhecido por Teflon®, é um polímero não absorvível e de grande interesse na área biomédica. O Teflon® é utilizado como membrana para barreira biológica em Odontologia quando se emprega a técnica de regeneração óssea guiada. Isso se deve à sua excelente biocompatibilidade, inércia química e também à sua baixa energia superficial que favorece principalmente nos eventos relacionados à osteogênese.

Atualmente, todas as membranas de Teflon® comercializadas no Brasil são importadas e possuem custo elevado. O objetivo deste trabalho foi o de avaliar uma membrana de poli(tetraflúor-etileno) para utilização como barreira biológica na técnica de regeneração óssea guiada em implantodontia.

Foram realizados ensaios para determinar a resistência mecânica e a degradação das membranas. A simulação da degradação foi realizada pela imersão das amostras em solução de SBF (*simulated body fluid*). A resistência mecânica foi determinada em ensaios de tração antes e após imersão em SBF, em seguida as amostras foram analisadas por microscopia eletrônica de varredura, para se verificar os mecanismos de deformação. Foi realizado também a análise termogravimétrica, espectroscopia no infravermelho e análise de calorimetria diferencial de varredura antes e após imersão em SBF. Os ensaios *in vitro* foram complementados por procedimentos cirúrgicos com a inserção do biomaterial (PTFE) em ratos

do tipo Wistar a fim de se avaliar a análise histológica do biofilme em contato com a membrana.

Os resultados obtidos revelaram que o material PTFE apresentou excelente biocompatibilidade, entretanto, em relação ao ensaio *in vivo*, ocorreu falha da membrana de PTFE devido à espessura de 0,05mm do material, não conferindo ao mesmo rigidez suficiente na manutenção do arcaço formado para facilitar a regeneração óssea adequada.

TRATAMENTO QUÍMICO DA SUPERFÍCIE DE IMPLANTES DE TITÂNIO

Autor: Luiz Eduardo Serra Carneiro Pinto

Orientador: Carlos Nelson Elias

Curso: Ciência dos Materiais

Tese defendida no IME, em 24/04/06

Apesar da excelente biocompatibilidade do titânio, as pesquisas são realizadas com o objetivo de tentar desenvolver modificações na superfície para reduzir o tempo de cicatrização (osseointegração) e aumentar a resistência da interface ossoimplante, principalmente para aqueles implantes que são utilizados para instalação imediata de próteses. No presente trabalho foram feitas alterações na superfície empregando-se a oxidação anódica e a imersão química para melhorar as interações bioquímicas do titânio no meio biológico e aumentar a força de remoção dos implantes osseointegrados. Foram utilizadas, nos tratamentos, soluções contendo cálcio, sódio, fósforo e flúor. Os resultados mostraram que, por meio da oxidação anódica, é possível obter topografias microscópicas com a presença de poros superficiais. Os tratamentos mudaram a composição química da superfície

dos implantes pela incorporação, na camada de óxido, dos íons da solução. Foram observadas também alterações cristalográficas com o surgimento de fases cristalinas em algumas das superfícies tratadas. O tratamento químico de imersão reduziu a rugosidade e alterou a composição da superfície dos implantes. A oxidação anódica e a imersão química demonstraram ser técnicas de utilização simples, versáteis e de baixo custo, que possibilitam a alteração química, topográfica e cristalográfica da superfície do titânio. As modificações obtidas dependem dos valores dos parâmetros dos ensaios, principalmente da densidade de corrente e natureza do eletrólito utilizado. Os melhores resultados *in vivo* foram obtidos pelas superfícies dos implantes tratados por oxidação anódica com cálcio e fósforo (Ca/P - OX.3) e pelos implantes tratados por imersão em solução de sódio e flúor (Na/F - IM.1) quando comparados à superfície dos implantes comerciais, Porous Plus. Os testes *in vivo* realizados neste estudo não foram conclusivos devido ao limitado número de amostras, contudo os resultados biomecânicos obtidos pelas superfícies acima foram consequência da ação conjunta das propriedades da superfície, tais como: topografia, composição química, cristalinidade e rugosidade/porosidade.

DETECÇÃO DE PADRÕES DE CÓDIGO EM WMLSCRIPT

Autor: Sérgio Augusto Freitas Filho
Orientador: Alex de Vasconcellos Garcia
Curso: Sistemas e computação
Tese defendida no IME, em 28/04/06

Este trabalho apresenta uma ferramenta de detecção de padrões de codificação para a linguagem *WMLScript*. Em nossa pesquisa não

encontramos outra ferramenta equivalente para esta linguagem. Em comparação com ferramentas similares para outras linguagens, a ferramenta é mais flexível e permite a criação de novos padrões de forma fácil e intuitiva. A ferramenta baseou-se em um trabalho análogo desenvolvido neste instituto para a linguagem Java.

Ilustramos o uso da ferramenta através da implementação de um conjunto de padrões de codificação para a linguagem *WMLScript*. Não temos conhecimento de um padrão de codificação publicado para a linguagem. Assim, apresentamos como uma contribuição adicional um conjunto de padrões de código para *WMLScript*.

Finalmente, para validarmos a funcionalidade da ferramenta e a utilidade dos padrões propostos, foi feito um estudo de caso aplicando-se os padrões a 16 programas de domínio público.

ELABORAÇÃO DE SÍMBOLOS MILITARES PARA AMBIENTE DE VISUALIZAÇÃO TRIDIMENSIONAL

Autora: Evânia Alves da Silva
Orientador: Prof. Dr. Luiz Felipe C. Ferreira da Silva
Curso: Engenharia Cartográfica
Tese defendida no IME, em 29/04/06

Este trabalho apresenta uma pesquisa sobre representação de símbolos militares em ambiente de visualização tridimensional aplicando estudos de comunicação, pressupondo a utilização da percepção visual. O desenvolvimento tecnológico ocorrido nas últimas décadas e, atualmente, as técnicas de computação gráfica têm possibilitado a extração de informações espaciais e a representação de objetos, permitindo uma visão tridimensional em ambiente computacional.

Esta representação foi realizada com base nos símbolos do Manual de Campanha C21-30 Abreviaturas, Símbolos e Convenções Cartográficas, que tem como finalidade estabelecer e padronizar as abreviaturas, símbolos e convenções cartográficas do Exército Brasileiro. Sendo assim, foram selecionados 15 símbolos militares de diferentes geometrias. Conseqüentemente, foram gerados símbolos de diferentes formas de representação: no formato matricial utilizando o programa *CorelDRAW 12*, que são chamados símbolos 2D com textura e 3D com textura, e os mesmos no formato vetorial, que são chamados de 2D e 3D utilizando a Biblioteca de programação *OpenGL*. Posteriormente, foram elaboradas seis pranchas, utilizando o Sistema de Visualização Tridimensional, que está em desenvolvimento no Instituto Militar de Engenharia – IME, que serviram para realização de testes de percepção visual.

Para avaliar e identificar a eficiência das pranchas, foram aplicados testes com profissionais militares da Escola de Comando e Estado-Maior do Exército – ECEME – e do IME. De acordo com as respostas obtidas nos testes realizados, os entrevistados obtiveram um percentual de acertos acima de 71% nas perguntas referentes aos símbolos, pois as perguntas priorizaram o desenho base do símbolo.

A presente pesquisa pode ser caracterizada como um passo inicial para o desenvolvimento de uma metodologia de criação de símbolos militares no ambiente tridimensional, mas os testes não atingiram o resultado esperado, apesar dos símbolos do Manual de Campanha C21-30 isoladamente parecerem satisfatórios. Porém, quando inseridos no SVT, não responderam da mesma forma, com perda de informações, o que pode ser interpretado como uma necessidade de correções que os símbolos e o

Sistema de Visualização Tridimensional – SVT precisam sofrer para obter uma leitura satisfatória.

Com relação à interface de programação, o *OpenGL* apresenta-se como uma ferramenta de auxílio à visualização tridimensional com um vasto campo de pesquisa a ser explorado.

O MERCADO DE TRANSPORTE COLETIVO SELETIVO URBANO DE PASSAGEIROS

Autora: Marina Cabreira Bastos

Orientador: Prof. Paulo Afonso Lopes da Silva

Curso: Engenharia de Transportes

Tese defendida no IME, em 02/05/06

Nos municípios brasileiros, os órgãos gestores, juntamente com o Poder Executivo, têm autonomia para definir o tipo de veículo empregado nas linhas do serviço de transporte coletivo urbano de passageiros por ônibus. Sendo assim, os gestores impõem às empresas operadoras o veículo e o nível de serviço a ser utilizado e, muitas vezes, não reavaliam no tempo devido a viabilidade de se continuar operando com determinado veículo, acarretando quedas no nível do serviço oferecido.

Por outro lado, o usuário do sistema de transporte coletivo urbano de passageiros está mais exigente, devido aos concorrentes que oferecem serviços mais confortáveis e personalizados, como o transporte informal e veículos particulares.

Assim, a implantação de um serviço seletivo, com níveis de serviço mais elevados, como melhores propostas de conforto, de tempo de viagem, de flexibilidade de trajeto e de tempo de espera, pode ser uma ferramenta de recuperação do desempenho e da produtividade do transporte

público e, também, de atração de antigos e novos usuários.

Contudo, o objetivo desta dissertação é propor uma metodologia para caracterização do mercado atual de transporte coletivo seletivo urbano de passageiros, por meio da determinação do perfil socioeconômico do usuário, da caracterização dos hábitos de viagens e da quantificação das demandas potenciais.

Destaca-se que, a fim de verificar a aplicabilidade da metodologia, foram realizados estudos de caso em Vitória/ES e Macaé/RJ. Constatando-se que os resultados deste tipo de alocação de demanda podem ser utilizados como um importante instrumento de auxílio às políticas de decisão quanto à escolha do meio de transporte a ser implantado ou aprimorado em determinada região, reduzindo as desutilidades inerentes às viagens.

O PAPEL DOS ORBITAIS MOLECULARES NA QUÍMICA: SOBRE OS LIMITES DOS ARGUMENTOS HOMO-LUMO PARA A REATIVIDADE

Autor: *Rodrigo Ribeiro da Silva*

Orientadores: *José Daniel Figueroa-Villar e Joana Mara Santos*

Curso: *Química*

Tese defendida no IME, em 04/05/06

Os orbitais moleculares são importantes descritores para a reatividade dos compostos. O conceito de orbitais de fronteira, introduzido por Fukui, relaciona a reatividade com as propriedades de dois orbitais moleculares: o HOMO e o LUMO. Uma das aplicações para os argumentos

HOMO-LUMO é na descrição do comportamento ácido-base para compostos.

No entanto, não existiam tais estudos para o sistema formado por ácidos carboxílicos e suas bases conjugadas. Para o estudo deste sistema, usou-se os métodos Hartree-Fock (HF) e da Teoria do Funcional de Densidade (DFT). Verificou-se que as energias do HOMO não previam um comportamento correto para a basicidade dos carboxilatos. Isso porque o HOMO nem sempre correspondia à carboxila dos compostos e, portanto, não poderia estar relacionado com a basicidade dos carboxilatos.

Buscou-se, então, o orbital molecular que governaria a reação de protonação dos carboxilatos usando como dados a composição dos orbitais e sua localização (posição dos planos nodais). Respeitando-se estes critérios, foi possível encontrar o orbital molecular responsável por essa reação.

A mesma idéia foi aplicada a um grupo formado por fenóxidos e alcóxidos, no qual o orbital molecular com as características desejáveis de composição e localização descreve corretamente o comportamento ácido-base para estes dois grupos, tratando-os como um só.

Com a aplicação destes critérios, chega-se a um orbital molecular de fronteira que efetivamente está controlando as reações. Portanto, este orbital molecular foi chamado de orbital molecular de fronteira efetivo para a reação (FERMO). Através deste conceito remove-se as limitações que existiam nos argumentos HOMO-LUMO e expande-se o conhecimento sobre os mecanismos das reações químicas. Além disso, os resultados obtidos pelo método HF e DFT são semelhantes quando se aplica o conceito do FERMO.

DESENVOLVIMENTO E TESTE DE UMA SONDA DE CAMPO ELÉTRICO PARA A FAIXA DE 2 A 3GHZ

Autora: *Catia Valdman*

Orientador: *Maurício H.C. Dias*

Curso: *Engenharia Elétrica*

Tese defendida no IME, em 05/05/06

Neste trabalho, duas sondas de campo elétrico foram implementadas a partir de dois cabos coaxiais semi-rígidos e caracterizadas para a faixa de 2 a 3GHz. Visando abranger todo o sistema de medição necessário para a calibração, baseado em normas vigentes nesta área, termos específicos foram identificados e conceitos básicos foram apresentados sobre sondas eletromagnéticas. Em seguida, a montagem das sondas foi descrita, bem como todo o procedimento para as suas caracterizações. Dentro deste contexto, foram realizadas simulações para investigar a influência das características físicas das sondas em parâmetros de avaliação previamente determinados (tensão, fator de performance e parâmetro de espalhamento S_{11}). Por último, a caracterização das sondas foi realizada dentro de uma câmara semi-anecóica, cujos resultados foram apresentados e discutidos.

PRODUÇÃO DE BIODIESEL A PARTIR DE ÓLEO RESIDUAL VIA CATÁLISE ÁCIDA

Autor: *Marcelo Munhoz de Souza Palma*

Orientador: *Luiz Eduardo Pizarro Borges*

Curso: *Química*

Tese defendida no IME, em 09/05/06

O biodiesel tem propriedades compatíveis ao diesel do petróleo, com a vantagem de emitir menos gases poluentes, menos materiais particulados e por ser renovável. Sendo assim, pode servir como substituto ou aditivo ao diesel do petróleo.

Atualmente, a maior parte do biodiesel é produzido a partir de óleos virgens através da reação de transesterificação, na qual se utiliza um catalisador básico, principalmente NaOH ou KOH. Porém, há uma grande quantidade de óleos não comestíveis, resíduos oleosos industriais, matérias-primas de baixo custo que estão disponíveis e que se apresentam como uma alternativa interessante para produção de biodiesel.

Uma complicação, à primeira vista, é que esses óleos contêm uma grande quantidade de ácidos graxos livres que, se conduzidos numa reação de transesterificação tradicional com catalisador alcalino, formará sabão e assim acarretará numa reação de baixo rendimento. Uma alternativa para esse processo é a esterificação desses ácidos com a utilização de um catalisador ácido.

Este trabalho teve por objetivo o reaproveitamento de um rejeito oleoso, rico em ácidos graxos, oriundo do processo de laminação a frio da Companhia Siderúrgica Nacional (CSN), porém, abre campo para o aproveitamento de outros resíduos industriais com altos teores de ácidos graxos.

O objetivo desse estudo foi investigar o efeito das variáveis de processo na reação de esterificação utilizando ácido sulfúrico como catalisador. A razão molar álcool/óleo, tipo de álcool, temperatura de reação, teor de catalisador, tempo de reação, presença de água no meio reacional foram os parâmetros estudados com intuito de determinar a melhor estratégia para produção de biodiesel. Paralelamente, foram realizados testes com catalisadores heterogêneos ácidos.

O estudo determinou como sendo as melhores condições de processo uma razão molar metanol/óleo 3:1, tempo de reação de 90 minutos, temperatura de 65°C, teor de 3% de catalisador ácido (em relação à massa de óleo), com uma agitação de moderada a intensa.

Com relação à catálise heterogênea, a resina ácida Amberlyst 35 (Rohm & Haas) apresentou resultados muito interessantes, demonstrando alta atividade e boa estabilidade.

O biodiesel obtido foi levado para caracterização e testes de queima em caldeira e motor a diesel. Os resultados de queima foram bastante satisfatórios, e, em ambos casos, houve uma menor emissão de CO e maior formação de CO₂ do que em relação ao diesel de petróleo, indicadores de uma queima mais completa.

A análise de índice de acidez se mostrou eficaz no monitoramento do avanço quantitativo da reação de esterificação. Em termos qualitativos, a análise por infravermelho se mostrou particularmente simples e rápida, sendo que, empregando as duas análises em conjunto, podemos avaliar com precisão a reação de esterificação.

PROCEDIMENTO PARA ANÁLISE DE PROJETO DE REDE LOGÍSTICA

Autor: Rodolfo Crystello Davariz

Orientador: Luiz Antônio Silveira Lopes

Curso: Engenharia de Transportes

Tese defendida no IME, em 09/05/06

Ao longo das últimas décadas, fatores como a globalização de economia, o aumento do nível de exigência dos clientes, a diminuição do ciclo de vida dos produtos e o avanço das tecnologias de informação têm exercido fortes pressões sobre o sistema logístico das empresas. Isso aumentou a necessidade de as empresas revisarem seus sistemas logísticos com maior frequência. Diante deste cenário, o conhecimento de técnicas e procedimentos que permitam planejar a rede logística torna-se de extrema relevância nos dias atuais. Considerado um dos principais problemas no planejamento logístico, o “Projeto de Rede

Logística”, como é conhecido na literatura, foi objeto de estudo de diversos autores em abordagens qualitativa e quantitativa. O objetivo do presente trabalho é propor um procedimento para a análise de projetos de rede logística, buscando conciliar ambas as abordagens. O estudo inclui ainda um levantamento dos principais aspectos das cadeias de suprimentos que influenciam o projeto de rede logística, uma revisão bibliográfica dos modelos existentes e um estudo de caso da cadeia de biodiesel de mamona no Nordeste brasileiro.

CARBETO DE MOLIBDÊNIO SUPORTADO EM DIFERENTES ZEÓLITAS COMO CATALISADOR DE HIDROCRAQUEAMENTO E HIDROISOMERIZAÇÃO

Autora: Andréa Gonçalves Moreira Rebello

Orientador: Victor Luís dos Santos Teixeira de Silva

Curso: Química

Tese defendida no IME, em 15/05/06

Este trabalho teve como objetivo estudar soluções inovadoras em termos de catalisadores para hidroisomerização (HIDW) e hidrocraqueamento (HCC), nos quais geralmente empregam-se catalisadores bifuncionais com função ácida e hidrogenante. A função hidrogenante é geralmente conferida por um metal do grupo da platina (Pt, Pd), enquanto que, na maioria das patentes disponíveis, a função ácida é dada por uma zeólita, geralmente de poros médios. Uma inovação é o uso de uma fase hidrogenante tipo carbeto de molibdênio. Surpreendentemente, são muito escassos os resultados na literatura sobre o uso destas fases suportadas em zeólitas.

Catalisadores, contendo teores de molibdênio iguais a 5 e 10% (p/p), foram preparados pelos métodos de impregnação ao ponto úmido e

espalhamento térmico empregando como suporte as zeólitas USY e BET A.

Os suportes foram caracterizados por fisissorção de N_2 , difração de raios X (DRX), ressonância magnética nuclear de Si e Al (RMN), infravermelho (IV) e Quimissorção de CO. A temperatura ótima de carburação foi determinada por carburação à temperatura programada (TPC), 650°C por 2 horas. Na forma carburada, os materiais foram empregados como catalisadores na reação de hidroisomerização e hidrocraqueamento do n-heptano a 300°C por 4 horas sob vazão de 50 mL min^{-1} de H_2 , tendo apresentado resultados promissores.

UMA NOVA ROTA DE PRODUÇÃO DE CARBETO DE NIÓBIO. SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E AVALIAÇÃO CATALÍTICA

Autor: Ayr Manoel Portilho Bentes Junior

Orientador: Victor Luis dos Santos Teixeira da Silva

Curso: Química

Tese defendida no IME, em 16/05/06

Desde o século passado o petróleo tem sido a mais importante fonte de combustíveis fósseis e a principal matéria-prima de uma série de produtos que abastecem a indústria química. Compostos contendo enxofre são exemplos de algumas das impurezas encontradas tanto no óleo cru quanto nos produtos refinados e que geram um impacto ambiental bastante negativo devido à formação de óxidos de enxofre (SOx). Por esse motivo, a legislação ambiental vem-se tornando cada vez mais rígida e específica, no sentido de reduzir os teores máximos permitidos desses compostos.

A remoção de heteroátomos indesejáveis é feita utilizando-se catalisadores CoMo/ Al_2O_3 e NiMo/ Al_2O_3 num processo conhecido como

hidrotreatamento (HDT). A busca por novos catalisadores de HDT mais ativos que os tradicionais tem-se concentrado basicamente na busca de novas fases ativas, novos suportes ou na combinação de ambos.

SÍNTESE E AVALIAÇÃO BIOLÓGICA DE DERIVADOS DE 5-CARBOXI-METIL-ISOXAZOLINAS

Autor: Rodrigo Martins Fráguas

Orientador: Alcino Palermo de Aguiar

Curso: Química

Tese defendida no IME, em 22/05/06

Neste trabalho, foram preparados quatro isoxazolininas, formados regioselectivamente a partir da reação 1,3 dipolar do óxido de nitrila. Para obtenção dos óxidos de nitrila foram utilizados como materiais de partida os seguintes aldeídos: benzaldeído, piperonal, anisalaldeído e 3-clorobenzaldeído, os óxidos de nitrila foram formados através da metodologia de cloração de aldoximas com ácido tricloro-isocianúrico, que oferece vantagens tanto na manipulação quanto no custo do reagente. Dos quatro compostos sintetizados, o produto obtido a partir do 3-cloro benzaldeído ainda não havia sido reportado na literatura. Os compostos obtidos tiveram suas atividades biológicas testadas frente a microorganismos, para os ensaios foram utilizadas bactérias gram-positivas (*Staphylococcus aureus*, e *Bacillus subtilis*) e gram-negativas (*Pseudomonas aeruginosa*, *Aeromonas hydrophilia*), fitonematóides (*Meloidogyne exigua*), fungos (*Aspergillus ochraeus*), formigas (*Hymenoptera: formicidae*) e o parasita bicho-mineiro do cafeeiro (*leucoptera coffeela*), os resultados mais promissores foram obtidos frente a fitonematóides e bactérias.

