

Seminário Parcial de Acompanhamento e Avaliação

Ciência e engenharia de nanomateriais aplicados a questões ambientais, energéticas, tecnológicas e biotecnológicas

Fundação de Apoio à Pesquisa do Distrito Federal

Equipe e instituição:

Universidade de Brasília –UnB.

Antônio Luciano de Almeida Fonseca(IF)

Jerome Depeyrot (IF)

Renata Aquino (FUP)

Demétrio Antônio da Silva Filho (IF)

Alex Fabiano Cortez Campos (FUP)

Fábio Luis de Oliveira Paula (IF)

Leonardo Luiz e Castro (IF)

Geraldo José da Silva (IF)

Tairone Paiva Leão (FAV)

Ariuska Karla Barbosa Amorim (FT)

Otilie Eichler Vercillo (FUP)

Roseline Strieder (IF)

Franciscarlos Gomes da Silva (IF)

Rafael Cabreira Gomes (IF)

Cleber Lopes Filomeno (IQ)

Fernando Henrique Martins (IF)

Universidade Federal do Rio Grande do Sul-(UFRGS)

Julian Denko Peshev

Gustavo Azevedo (Sirius)



Breve contextualização do projeto e relevância do tema

□ NANOMATERIAIS AVANÇADOS

- materiais inteligente que podem ter suas propriedades significativamente alteradas e controladas por estímulos externos, como aplicação de campo magnético e/ou elétrico, gradiente de temperatura, força iônica e pH do meio.
- o domínio dos processos de síntese e fabricação desses materiais está fortemente relacionado ao controle de suas propriedades físicas e químicas, origem do forte apelo para as inúmeras possibilidades de aplicações.

□ A PROPOSTA

- consolidar e ampliar o núcleo existente com a inclusão de novas temáticas promissoras abrangendo aplicações ambientais, energéticas, tecnológicas e biotecnológicas.
- Nanopartículas, nano-híbridos, nanocoloides magnéticos e nanoargilas e nanofotovoltaicos

Objetivos propostos x realizados

1) Nanofabricação e design de materiais avançados

- ❑ Nanopartículas do tipo núcleo/casca (ferritas e ferritas mistas, manganitas e cromitas), nanohíbridos e dispersões em solventes verdes e líquidos iônicos
- ❑ Nanopartículas multicomponentes do tipo óxido magnético/metál.

2) Investigação das propriedades dos nanomateriais avançados produzidos visando aplicações ambientais, energéticas, tecnológicas e biotecnológicas.

- ❑ Estudo da composição química, do tamanho, da estrutura interna, e da reatividade de superfície; estudo da estrutura da textura e da dinâmica de nanomateriais coloidais diluídos e concentrados
- ❑ Estudo do comportamento eletroquímico e eletroforético de nanomateriais coloidais; estudo das propriedades magnéticas

3) Modelagem e simulação molecular dos nanomateriais elaborados

- ❑ Caracterização das propriedades eletrônicas e ópticas de nanoestruturas fotovoltaicas.
- ❑ Estudo, em nível mesoscópico, das nanopartículas e nanocolóides, utilizando métodos de Dinâmica Molecular e Teoria do Funcional da Densidade

Objetivos propostos x realizados

4) Aplicações ambientais, energéticas, tecnológicas e biotecnológicas dos nanomateriais avançados produzidos

□ Aplicações em tecnologia ambiental:

nanoadsorventes magnéticos, implementação de uma estação experimental, em pequena escala, de tratamento de águas residuárias.

□ Aplicações energéticas:

Nanocatalisadores,

termodifusão e termoeletricidade,

produção de hidrogênio (decomposição termoquímica da água)

□ Aplicações tecnológicas

Otimização de nanomateriais no desenvolvimento de bombas de resfriamento magnético com elaboração de protótipo.

Desenvolvimento de métodos híbridos de MQ/DM para investigar os processos de transferência, separação e recombinação de carga em fotovoltaicos orgânicos.

Objetivos propostos x realizados

- Aplicações biotecnológicas dos nanomateriais elaborados
Estudos in vitro, in vivo. Medidas de taxa de absorção específica (SAR)

5) Desenvolvimento de mecanismos e de atividades de difusão e transferência de ciência e tecnologia

- Criação e manutenção de portal eletrônico e mídias sociais
- Organização de eventos e promoção de visitas de professores e alunos da rede pública de ensino do DF e da RIDE nos laboratórios do núcleo e elaboração de material didático e de divulgação científica.
- Organização de evento científico internacional em nanomateriais.
- Proposição/estabelecimento de parceria/convênio/contrato com incubadoras de empresas de base tecnológica, ligadas às aplicações dos nanomateriais e/ou softwares desenvolvidos

Objetivos propostos x realizados

6) Formação de recursos humanos, nucleação e interação entre pesquisadores das equipes envolvidas

- Orientação de alunos de pós-graduação (mestrado e doutorado) e graduação (iniciação científica, trabalho de conclusão de curso e extensão)
- Consolidação da infraestrutura de pesquisa e desenvolvimento na área de nanomateriais no Distrito Federal
- Nucleação e interação entre pesquisadores, professores e alunos de pós-graduação das equipes envolvidas por meio da realização de workshops envolvendo os membros de todas as equipes.
- Atuação na consolidação dos programas de pos-graduação nota 3 vinculados a proposta.

7) Geração de produtos tecnológicos e científicos de impacto

Publicação de artigos científicos em revista com seletiva política editorial, nos extratos superiores da classificação *Qualis*.

Proposição de patentes e/ou programas de computador

Materiais e Métodos

☐ **Nanomateriais avançados**

- Nanopartículas bimagnéticas à base de ferritas
- Carbon dots
- Argilas
- Nanomateriais fotovoltaicos
- Nanocoloides Magnéticos: água, líquidos iônicos e solventes verdes
- Nanoadsorventes
- Nanofluidos multifuncionais

☐ **Métodos e Técnicas Experimentais**

- Síntese Química de nanomateriais, preparação de coloides e nanofluidos
- Caracterização Físico Química: FAAS, DRX (Rietveld), NPD, SAXS, EXAFS, XANES, EDS, EDX, TEM, FRS, titulometria.
- Caracterização Magnética: magnetometria (SQUID e PPMS) e susceptometria AC e DC, magnetohipertermia
- Simulações computacionais: Química Quântica, DFT, Dinâmica Molecular e Monte Carlo

Atividades planejadas x realizadas

1 Nanofabricação e design de materiais avançados

- 75% de atividades realizadas
- em andamento
 - nanopartículas de ferritas com vários metais divalentes
 - nanopartículas à base de manganitas e cromitas

2 Investigação das propriedades dos nanomateriais produzidos

- 60% de atividades realizadas
- em andamento
 - caracterização morfoquímica
 - magnetometria e susceptometria AC
 - medidas em grandes instrumentos (suspensas/COVID-19)

3 Modelagem e simulação molecular dos nanomateriais elaborados

- 80% de atividades realizadas
- em andamento
 - Estudo das nanopartículas e nanocoloides utilizando por Dinâmica Molecular DFT

Atividades planejadas x realizadas

4 Aplicações ambientais, energéticas, tecnológicas e biotecnológicas

- 60% de atividades realizadas
- suspensas/COVID-19
 - Termoeletricidade, catálise

5 Desenvolvimento de mecanismos e de atividades de difusão e transferência de ciência e tecnologia

- 90% de atividades realizadas
- em andamento
 - Conferências em assuntos correlatos ao projeto
 - Criação de portal eletrônico e mídias sociais

6 Formação de recursos humanos, nucleação e interação entre pesquisadores das equipes envolvidas

- 80 % de atividades realizadas
- em andamento
 - Orientações em nível de graduação e pós graduação
 - Criação do curso de doutorado PPGCIMA/UnB

Recurso aprovado x gasto

Data da situação 27/05/2021

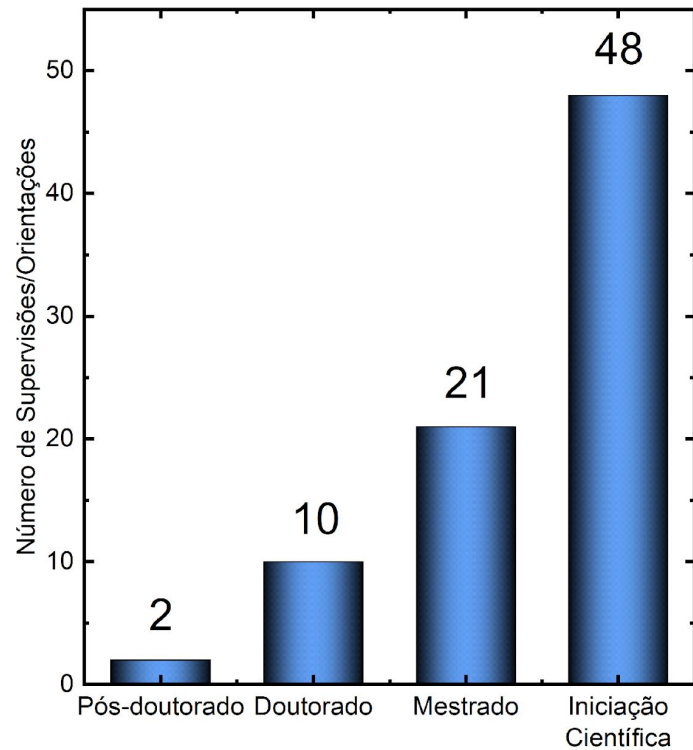
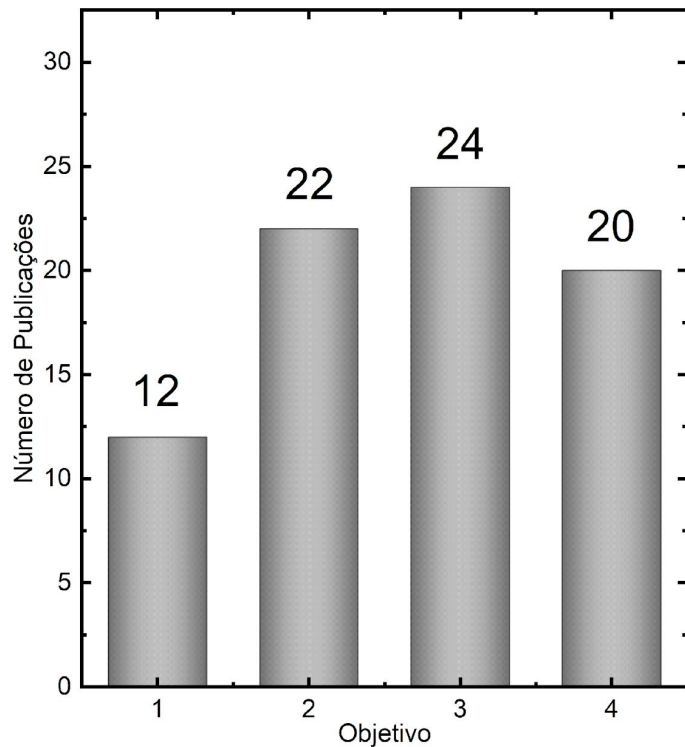
	Recursos Liberados	Recursos Gastos	Saldo
Capital	399.996,00	109.576,86	290.419,14
Custeio	475.194,00	226.335,12	248.858,88
Bolsa	124.800,00	124.800,00	0,00
Saldo	999.990,00	460.711,98	539.278,02
Saldo com rendimentos		547.473,20	

1ª cota: 05/07/2017. 562.395,00 (capital: R\$146.000,00)

2ª cota: 20/02/2020 437.595,00

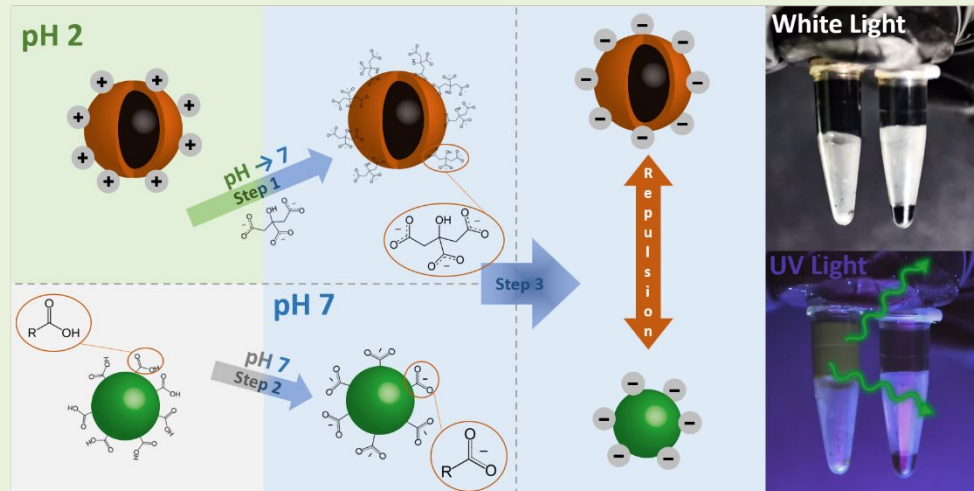
Resultados parciais alcançados

Produção Científica e formação de recursos humanos

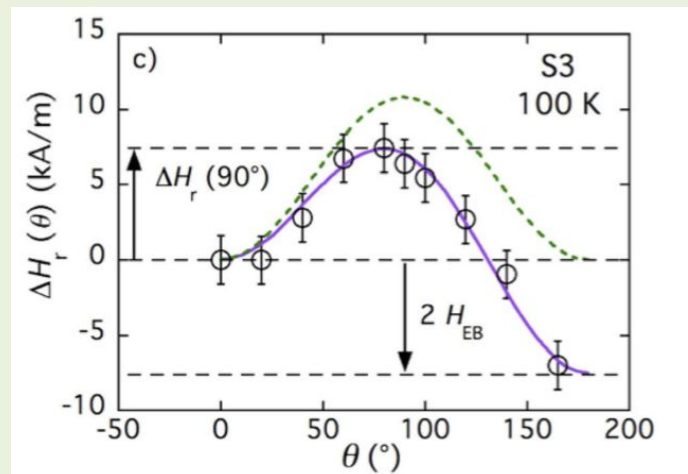


Resultados parciais alcançados

Nanofluidos magnetofluorescentes

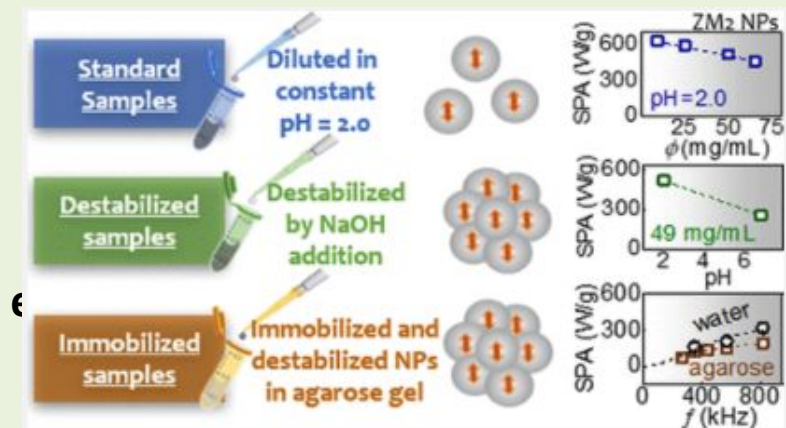
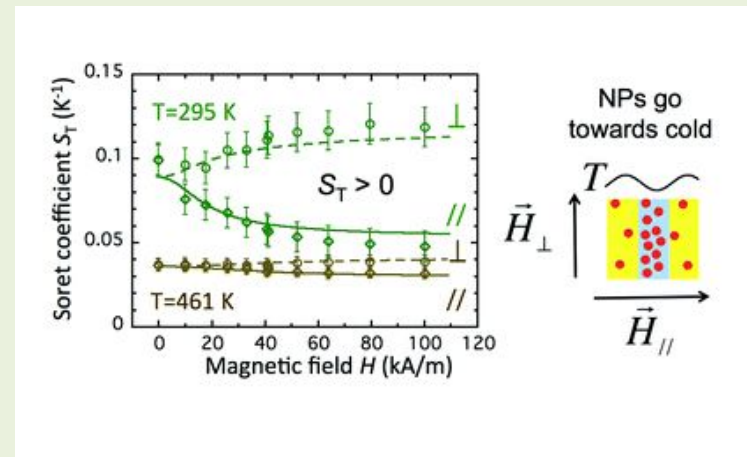


Campos de anisotropia e de Exchange em nanopartículas do tipo core/shell



Resultados parciais alcançados

Anisotropia de termodifusão à base de ferrofluidos iônicos em presença de campo externo



atos de concentração e estabilidade
são de energia

Nano adsorventes bimagnéticos para remoção de cromo hexavalente em água

