

GLASSPANACEA: UM SOFTWARE EFICIENTE PARA A FORMULAÇÃO DE MATERIAIS CERÂMICOS**Renato Luiz Siqueira***, José Henrique Alano^b, Oscar Peitl^a e Edgar Dutra Zanotto^a**^aDepartamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos, Rodovia Washington Luís km 235, 13565-905 São Carlos – SP, Brasil^bDepartamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de Pelotas, Rua Gomes Carneiro 1, 96010-610 Pelotas – RS, Brasil

Recebido em 31/10/2017; aceito em 14/12/2017; publicado na web em 01/02/2018

GLASS-PANACEA: AN EFFICIENT SOFTWARE FOR THE FORMULATION OF CERAMIC MATERIALS. *GlassPanacea* is an efficient software tool that combines several attractive technical features with ease of use. Its configuration leads to the intuitive handling and learning with accurate results, providing the users with flexibility in the selection of suitable chemicals for the formulation of glassy, partially glassy or crystalline ceramic materials, as well as speed and accuracy in the calculation of the relative proportions of each chemical in a batch. The software runs directly from an executable file with multiplatform support. Hence, it can be used on different operating systems, such as Windows, Linux and Mac OS, without installation. One of its highlights is the user-friendly interface that enables immediate application, even for operators with little computer experience. This makes *GlassPanacea* a very valuable tool for students, researchers and engineers who work on the development of ceramic materials using different synthesis techniques, such as melting, solid-state reaction, sintering and sol-gel processing. The archive containing the software, information for use and logo can be downloaded, free of charge, from <http://www.certev.ufscar.br/research-1/glasspanacea-glass-and-ceramic-formulation-software>.

Keywords: *GlassPanacea*; formulation; glass; glass-ceramic; ceramic material.**INTRODUÇÃO**

Os materiais cerâmicos podem ser classificados como inorgânicos e não-metálicos.¹ Suas propriedades, assim como a de todos os materiais, são ditadas pelos átomos presentes, tipo de ligação existente entre esses átomos e a forma como eles se estruturam. O tipo de ligação e a estrutura ajudam a determinar quais são as propriedades do material. Geralmente, as cerâmicas apresentam uma combinação de ligações do tipo iônica e covalente, o que resulta em materiais com elevado módulo elástico e dureza, alto ponto de fusão, baixa expansão térmica e boa resistência química. Devido a essas características, os materiais cerâmicos vêm sendo utilizados em inúmeras aplicações desde a antiguidade. Além do uso doméstico e na construção civil, esses materiais também possuem aplicações sofisticadas nos setores de telecomunicação, armazenamento e geração de energia (por exemplo, novas baterias e células combustíveis de óxidos, SOFC), proteção balística, eletrônica, sistemas ópticos, catalisadores e, ainda, na reparação de tecidos, ossos e dentes nas áreas médica e odontológica.²

Mesmo com uma história notável que remonta a milhares de anos, ainda é possível desenvolver uma infinidade de novos materiais cerâmicos que podem promover avanços significativos na vida moderna. Em 2004, Zanotto e Coutinho³ lançaram uma discussão sobre esse assunto considerando apenas materiais não cristalinos. Segundo os autores, algo em torno de 10^{52} composições de materiais não cristalinos podem, a princípio, ser sintetizadas, considerando os 80 elementos químicos mais usuais da tabela periódica – com combinações variando 1% em mol. Como “apenas” 4×10^5 composições de vidros foram reportadas até o momento (*SciGlass 7.0*), o campo da ciência e tecnologia nesse segmento está longe de ser esgotado, podendo trazer muitas surpresas positivas no futuro. Isso sem considerar os materiais parcialmente vítreos, como as vitrocerâmicas⁴ e as cerâmicas cristalinas,^{1,2} o que torna essa área de estudo ainda muito mais interessante e surpreendente.

Em relação à produção, os materiais cerâmicos podem ser sintetizados por uma grande variedade de técnicas, embora todo o processo seja iniciado com a seleção das matérias-primas ou dos reagentes, seguido de cálculos estequiométricos de suas proporções relativas. Os cálculos envolvidos podem variar desde muito simples até relativamente complexos, dependendo do número de elementos exigidos na composição e da natureza dos reagentes que serão utilizados para o preparo da mistura reacional. Dessa forma, além de poder haver dispêndio desnecessário de tempo, erros de cálculo também são muito comuns nessa etapa, e às vezes eles nunca são percebidos ou apenas são notados tardiamente, acarretando severos prejuízos seja na fabricação dos materiais, seja nas pesquisas resultantes. Portanto, a fim de proporcionar flexibilidade na escolha dos reagentes de partida, bem como velocidade e precisão nos cálculos das massas que deverão ser utilizadas na síntese dos materiais de interesse, apresentamos o programa de computador *GlassPanacea*. De interface amigável e combinando recursos com facilidade de uso, a proposta do programa é que a experiência produzida por sua utilização seja satisfatória ao usuário por meio de fácil manuseio e aprendizado.

HISTÓRICO E ELABORAÇÃO DOS ALGORITMOS

Após várias discussões para se elaborar os algoritmos e definir o leiaute, a primeira versão do programa foi lançada em 17 de maio de 2015.⁵ Devido às várias críticas construtivas e sugestões recebidas, a segunda versão foi lançada no dia 17 de julho do mesmo ano, mas com a divulgação e disponibilização ainda um pouco restrita. Buscando maior visibilidade e que a ferramenta seja de conhecimento público, com acesso livre, apresentamos neste artigo a terceira versão já com o nome de *GlassPanacea* e registro no Instituto Nacional da Propriedade Industrial (INPI),⁶ além de contar com o leiaute melhorado, novas funcionalidades e correção de alguns *bugs* – dando maior estabilidade ao programa.⁷ A título de curiosidade, na mitologia grega *Panacea* era a deusa da cura,⁸ o que torna o nome do aplicativo sugestivo, uma vez que a sua finalidade é exatamente “remediar” os problemas envolvidos na formulação de materiais cerâmicos vítreos, parcialmente vítreos ou cristalinos.

**e-mail: rastosfix@gmail.com

Para o desenvolvimento do programa, utilizamos a linguagem de programação Java.⁹ Essa linguagem permite o desenvolvimento de aplicações portáteis de alto desempenho para uma ampla variedade de plataformas de computação, permitindo a elaboração de trabalhos de forma produtiva e eficiente. Além disso, o Java é uma linguagem relativamente simples que não exige treinamento específico, desde que se esteja em sintonia com as práticas atuais de programação. Os algoritmos elaborados para executar os cálculos estequiométricos tiveram como base a relação existente entre as frações de massa dos componentes do sistema pretendido e a massa dos reagentes selecionados para fornecer cada constituinte desejado ao sistema.^{10,11} Dessa forma, a porcentagem de cada constituinte é convertida em uma massa definida (mensurável) do reagente escolhido, de acordo com a Equação 1:

$$\% \text{ em massa} = \frac{m_r(\text{g})}{m_p(\text{g})} \times F \times 100 \quad (1)$$

sendo m_r a massa do reagente que deverá ser utilizada no preparo da mistura reacional, m_p a quantidade de produto desejado no experimento (ambos expressos em gramas) e F o fator gravimétrico.

Nem sempre a massa do reagente selecionado será igual à do componente que se pretende suprir, uma vez que suas massas molares podem ser distintas. Torna-se necessário, então, calcular o fator gravimétrico, isto é, a relação entre a massa molar do componente de interesse (M_c) e a massa molar do reagente utilizado (M_r), levando em conta os índices da fórmula química de ambos para que o número de átomos envolvidos seja balanceado. Assim, temos a Equação 2:

$$F = \frac{M_c(\text{g}) \times v_1}{M_r(\text{g}) \times v_2} \quad (2)$$

em que v_1 e v_2 representam os índices para balancear os elementos envolvidos.

Por exemplo, para se calcular a massa de nitrato de prata (AgNO_3) necessária para suprir o componente Ag_2O na preparação de 250 g de um fosfato de composição 70% P_2O_5 , 15% CaO , 10% Na_2O e 5% Ag_2O (% em massa), deve-se inicialmente determinar o fator gravimétrico, como mostra a Equação 3:

$$F = \frac{M_{(\text{Ag}_2\text{O})} \times v_{\text{Ag}(r)}}{M_{(\text{AgNO}_3)} \times v_{\text{Ag}(c)}} = \frac{231,7358 \text{ g mol}^{-1} \times 1}{169,8731 \text{ g mol}^{-1} \times 2} = 0,6820850 \quad (3)$$

Reorganizando a Equação 1, temos:

$$m_{(\text{AgNO}_3)} = \frac{m_p \times \% \text{ em massa}}{F \times 100} = \frac{250 \text{ g} \times 5\%}{0,6820850 \times 100} = 18,32616 \text{ g} \quad (4)$$

Logo, a massa de nitrato de prata que deverá ser utilizada para fornecer 5% de Ag_2O na preparação de 250 g desse material é de 18,32616 g (considerando-se o reagente com 100% de pureza). Para os demais constituintes, os cálculos são análogos. Por outro lado, utilizando-se o *GlassPanacea*, todos os cálculos são realizados simultaneamente de forma rápida e precisa, proporcionando economia de tempo e de materiais, como planilhas e cadernos que seriam utilizados para a realização manual dos cálculos. Vale mencionar, ainda, a possibilidade de simular, em poucos minutos, inúmeras combinações de reagentes que podem ser empregados no mesmo experimento.

OPÇÕES BÁSICAS E RECURSOS ADICIONAIS

A área de trabalho da versão atual do *GlassPanacea* (versão 3.0 Beta) possui uma configuração simples e intuitiva, visando à

combinação de recursos com facilidade de uso. O ícone **Banco de dados**, por exemplo, disponível na barra de ferramentas padrão, permite a consulta e o cadastro de novas substâncias (reagentes) para a simulação dos cálculos. É importante ressaltar que o banco de dados é aberto, possibilitando que o usuário construa a sua própria base. No programa, consta um banco de dados pré-cadastrado que, como mencionado, poderá ser complementado conforme a necessidade do usuário. Para inserir uma nova substância, é necessário digitar a sua fórmula química e a massa molar nos respectivos campos. Em seguida, basta acionar o botão **Cadastrar** para que os dados sejam incluídos – a disposição das substâncias cadastradas é automática e feita em ordem alfabética. Para ajudar nessa tarefa, uma tabela periódica é disponibilizada por meio do ícone de informação localizado no canto inferior direito da janela. São disponibilizadas também as funções **Editar** e **Excluir**, caso haja necessidade de alteração de algum dado, como mostra a Figura 1.



Figura 1. Banco de dados para consulta e cadastro de substâncias

O ícone **Formulação**, na barra de ferramentas, dá acesso à janela para realização dos cálculos. Nessa janela do programa, alguns recursos são disponibilizados, tais como a possibilidade de se determinar a quantidade de produto a ser preparado, a conversão do percentual em mol de cada componente do sistema pretendido para massa ou fração molar e o ajuste de pureza dos reagentes selecionados. Para facilitar a explicação de funcionamento, na Figura 2 são destacadas duas seções nessa janela: a primeira (i), compreendendo as etapas de 1 a 4, e a segunda (ii), as etapas de 5 a 7. As imagens ampliadas e detalhadas dessas seções são mostradas nas Figuras 3 e 4, respectivamente.

Seguindo os passos sugeridos, na etapa 1 o usuário determina a quantidade de produto desejado. O programa foi desenvolvido para simular a preparação desde poucos gramas até toneladas de material, atendendo tanto laboratórios de pesquisa, onde é comum a preparação de pequenas quantidades de amostra, como indústrias, com produção em larga escala. Na etapa 2, é necessário indicar o número de componentes do sistema pretendido, tendo como opção o máximo de dez componentes. Considerando um sistema formado por óxidos, como o $\text{Li}_2\text{O}-\text{ZrO}_2-\text{SiO}_2$ (LZS), entende-se como componente cada um dos óxidos individuais que constituem o sistema – nesse caso, sendo o componente 1 = Li_2O , o componente 2 = ZrO_2 e o componente 3 = SiO_2 .

Com a escolha do número de componentes, nas demais etapas é habilitado um número correspondente de campos para a inserção dos dados. Dessa forma, se o sistema pretendido possuir três componentes, como mostra a Figura 2, estarão habilitados nas etapas de 3 a 6 apenas três campos para que sejam fornecidas as informações necessárias para a realização dos cálculos. Para facilitar a escolha dos componentes, na etapa 3 é disponibilizado um filtro de seleção. Assim, é possível selecionar os componentes de interesse a partir da

Figura 2. Visão geral da área de formulação

lista geral de substâncias cadastradas no banco de dados ou agrupá-los de uma forma específica, como, por exemplo, em óxidos.

Normalmente, a composição de um sistema é expressa em termos das porcentagens molares ou mássicas de cada constituinte. Menos comum, mas também encontrada na literatura, é a notação em que se utilizam as frações molares dos constituintes. Devido a essas variações,

disponibilizamos na etapa 4 os três modos para que o usuário tenha liberdade de escolher a notação que lhe for mais conveniente. Caso haja interesse na conversão de uma forma para outra, basta acionar o botão **Converter** e serão gerados resultados como os demonstrados na Tabela 1 para o fosfato contendo 70%P₂O₅, 15%CaO, 10%Na₂O e 5%Ag₂O (% em massa). Para auxiliar no preenchimento dos campos, um contador, destacado em amarelo, é exibido para a contabilização da fração total do sistema (100). A contagem é decrescente, sendo o valor descontado à medida que o percentual dos componentes é inserido. Dessa forma, o valor zero (0) indica que todos os campos foram corretamente preenchidos.

Tabela 1. Conversão composicional

Componentes	% em massa	% em mol	fração molar
P ₂ O ₅	70,00	52,2649	1,0000
CaO	15,00	28,3488	0,5424
Na ₂ O	10,00	17,0996	0,3272
Ag ₂ O	5,000	2,28670	0,0438

Na etapa 5, devem ser selecionados os reagentes que irão suprir cada componente do sistema de acordo com suas respectivas frações. Ao acessar a guia de seleção, são mostradas todas as substâncias cadastradas no banco de dados. Isso proporciona flexibilidade na escolha e permite a simulação de diferentes combinações de reagentes que possam ser adequados ao experimento num intervalo muito curto de tempo.

Para atender às necessidades de um maior número de usuários, o programa dispõe de alguns recursos extras na etapa 6. Definidos como parâmetros de ajuste, eles estão disponíveis nas abas designadas como **Grau de pureza**, **Reagente extra** e **Reagente duplo**. A descrição de cada um deles pode ser acessada no programa por meio do ícone de informação, localizado no canto superior direito, e se dá conforme a seguinte relação:

Figura 3. Visão ampliada da área de formulação: destaque para as etapas de 1 a 4

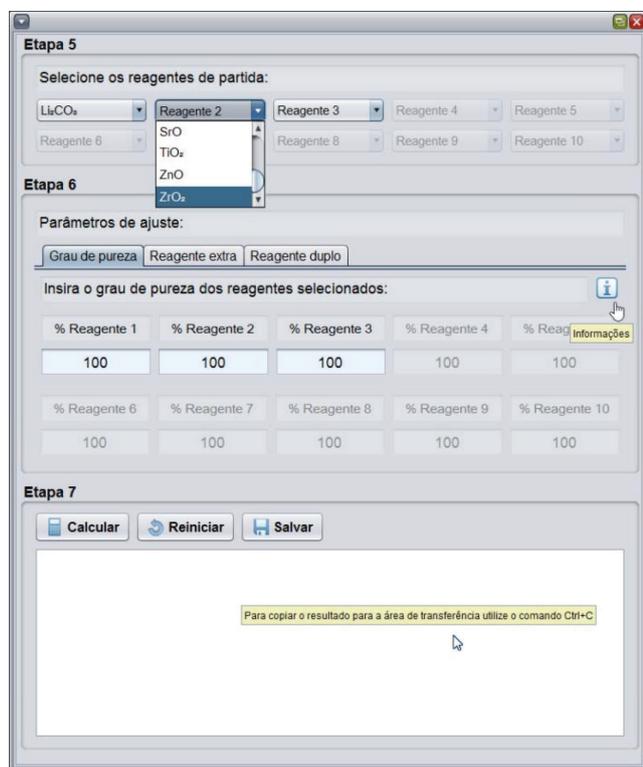


Figura 4. Visão ampliada da área de formulação: destaque para as etapas de 5 a 7

- 1º: acionando a aba **Grau de pureza**, é possível inserir a porcentagem de pureza de cada reagente selecionado. Assim, um ajuste é realizado no valor final da massa que deverá ser utilizada para a preparação do material de interesse. No programa, todos os campos de preenchimento relativos ao grau de pureza são destacados em azul e se iniciam com o valor de 100%;
- 2º: para controlar processos de oxirredução, às vezes é preciso utilizar dois reagentes distintos para suprir o mesmo componente no sistema. Ao acionar a aba **Reagente extra**, é necessário primeiramente inserir o segundo reagente que será utilizado e, na sequência, informar o percentual do componente que esse novo reagente deverá suprir, bem como o seu grau de pureza;
- 3º: alguns reagentes podem fornecer dois componentes para um sistema simultaneamente. O hidrogenofosfato de sódio (Na_2HPO_4), por exemplo, fornece o Na_2O e o P_2O_5 . Acionando a aba **Reagente duplo**, basta selecionar no respectivo campo qual o segundo componente fornecido pelo reagente em questão. Como precaução, quando algum dos reagentes fornecer componentes iguais, um aviso será lançado, orientando o usuário a indicar qual é o segundo componente fornecido. Feito isso, o ajuste nos cálculos será realizado automaticamente.

Após a realização das etapas de 1 a 6, acionando o botão **Calcular**, na etapa 7, é gerado um relatório contendo os passos adotados pelo usuário, bem como a massa dos reagentes que deverá ser utilizada para a obtenção do produto de interesse. A Tabela 2 mostra os resultados de algumas simulações envolvendo diferentes combinações de reagentes para o preparo do fosfato de composição 70% P_2O_5 , 15% CaO , 10% Na_2O e 5% Ag_2O (% em massa), discutido anteriormente. Nessa etapa, as opções de reiniciar os cálculos ou salvar os resultados também são disponibilizadas.

Com a utilização do programa, todos os resultados envolvidos em uma simulação são gerados simultaneamente, como mostra a Tabela 2, suplantando o uso de materiais que seriam empregados na realização manual dos cálculos. Além disso, a facilidade e a rapidez na troca de reagentes permitem simular diferentes situações em poucos minutos. Nas simulações 1 e 2, por exemplo, consideramos reagentes comumente utilizados na síntese via fusão ou rota cerâmica tradicional (envolvendo reações de decomposição e processos difusionais no estado sólido), como os carbonatos de sódio (Na_2CO_3) e cálcio (CaCO_3), o sulfato de prata (Ag_2SO_4) e o pentóxido (P_2O_5) ou o dihidrogenofosfato de amônio ($\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$), para suprir o componente P_2O_5 . Já a simulação 3 foi direcionada para a síntese do mesmo material utilizando-se o processo sol-gel, no qual o trietilfosfato ($\text{OP}(\text{OCH}_2\text{CH}_3)_3$) é muito empregado devido à sua facilidade de manuseio, e os nitratos de sódio (NaNO_3), cálcio ($\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) e prata (AgNO_3), pela alta solubilidade em meio aquoso.¹²

Outro ponto importante em relação às simulações é a facilidade que o programa proporciona de se inserir o grau de pureza dos reagentes, muitas vezes negligenciado na composição final da mistura reacional. Os resultados mostrados na Tabela 2 foram gerados considerando-se os reagentes com 100% de pureza. Na prática, isso ocorre apenas na produção de certos medicamentos ou em análises químicas muito especiais. Normalmente, trabalhamos com substâncias que apresentam certa porcentagem de impurezas. Refazendo-se a simulação 1 considerando-se o pentóxido de fósforo com 98% de pureza, os carbonatos com 97% e o sulfato de prata com 99%, observamos que os valores das massas que deveriam ser utilizadas para a preparação do material são alterados de forma considerável (178,5714 g de P_2O_5 , 69,00000 g de CaCO_3 , 44,07400 g de Na_2CO_3 e 16,98860 g de Ag_2SO_4), principalmente naquelas em que o teor de pureza é mais baixo, como no caso dos carbonatos. Dessa forma, fica evidente que o fato de não considerar a pureza dos reagentes implica na obtenção de um material com composição diferente da inicialmente planejada. Infelizmente, essa distração e alguns erros de cálculo, muitas vezes, passam despercebidos ou são detectados apenas em uma fase mais avançada de um estudo, quando os autores descobrem que algumas propriedades do seu material (como a densidade, a viscosidade ou o coeficiente de dilatação térmica) ficam aquém do valor esperado. Por isso, a importância de uma ferramenta como o *GlassPanacea*, na qual todas essas questões são levadas em consideração.

Por fim, o ícone **Ajuda**, no menu de ferramentas padrão, permite acessar um manual contendo informações gerais e um passo

Tabela 2. Simulações para formulação de uma amostra de fosfato

Composição (% em massa)	Reagentes para pesagem					
	Formulação 1		Formulação 2		Formulação 3	
70% P_2O_5	175,00 g	P_2O_5	283,62 g	$\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$	449,15 g	$\text{OP}(\text{OCH}_2\text{CH}_3)_3$
15% CaO	66,93 g	CaCO_3	66,93 g	CaCO_3	157,92 g	$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
10% Na_2O	42,75 g	Na_2CO_3	42,75 g	Na_2CO_3	68,57 g	NaNO_3
5% Ag_2O	16,82 g	Ag_2SO_4	16,82 g	Ag_2SO_4	18,33 g	AgNO_3

a) Formulações para o preparo de 250 g de produto. b) Valores aproximados para duas casas decimais.

a passo sobre os recursos disponíveis no programa. Na caixa de diálogo **Sobre** também há informações a respeito da versão atual do programa, atualizações e o contato dos desenvolvedores para suporte técnico, uma vez que o aplicativo pode apresentar *bugs* e problemas de instabilidade por ainda se tratar de uma versão Beta.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O desenvolvimento do programa *GlassPanacea* exigiu empenho de longo prazo com base na experiência de diferentes grupos de pesquisa. Até onde sabemos, não há nada similar disponível no meio acadêmico – empresas costumam utilizar seus próprios *softwares*. Com uma abordagem única, o programa possui aplicabilidade em laboratórios e centros de pesquisa, o que inclui universidades, faculdades, institutos de educação tecnológica e empresas que atuam no desenvolvimento de materiais cerâmicos vítreos, parcialmente vítreos ou cristalinos. Assim, proporcionando aos usuários agilidade na etapa de escolha de reagentes adequados à formulação, bem como na definição de suas respectivas massas que deverão ser utilizadas para o preparo das misturas que serão posteriormente processadas para a obtenção dos materiais de interesse. Além disso, o programa está apto à incorporação de novas funcionalidades, possibilitando atender às especificidades dos usuários.

Para finalizar, a versão (3.0 Beta) mais atual do programa *GlassPanacea* está disponível nos idiomas Português, Espanhol e Inglês, e pode ser adquirida gratuitamente no *site* <http://www.certev.ufscar.br/research-1/glasspanacea-glass-and-ceramic-formulation-software>. Esperamos que os leitores utilizem e testem o programa. Críticas e/ou sugestões serão de grande valia para que possamos melhorar e ampliar suas funcionalidades.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos à FAPESP (CEPID – Processo n°. 2013/07793-6)

pelo suporte financeiro, ao CNPq (Processo n°. 140516/2013-1) e à CAPES/PNPD pelas bolsas de estudo concedidas a R. L. Siqueira e J. H. Alano, respectivamente. Estendemos nossos agradecimentos aos pesquisadores J. F. O. Mosquera e A. M. N. Muñoz (LaMaV/UFSCar), pela ajuda na versão em Espanhol do programa, a T. S. Pinto (LIPEMVALE/UFVJM) e aos professores F. C. Serbena (UEPG), E. B. Ferreira (USP) e M. O. C. Villas-Boas (UFSCar) pelas valiosas sugestões e incentivo.

REFERÊNCIAS

1. Carter, C. B.; Norton, M. G.; *Ceramic materials: science and engineering*, 2nd ed., Springer/Verlag: New York, 2013.
2. Richerson, D. W.; *The magic of ceramics*, 2nd ed., Wiley/American Ceramic Society: Westerville, 2012.
3. Zanotto, E. D.; Coutinho, F. A. B.; *J. Non-Cryst. Solids* **2004**, *347*, 285.
4. Zanotto, E. D.; *Am. Ceram. Soc. Bull.* **2010**, *89*, 19.
5. Siqueira, R. L.; Alano, J. H.; Peitl, O.; Zanotto, E. D.; *Anais do 59º Congresso Brasileiro de Cerâmica*, Barra dos Coqueiros, Brasil, 2015.
6. Siqueira, R. L.; Alano, J. H.; Peitl, O.; Zanotto, E. D.; *Processo: BR 51 2015 001499-4*, **2016**.
7. Siqueira, R. L.; Alano, J. H.; Peitl, O.; Zanotto, E. D.; *Am. Ceram. Soc. Bull.* **2017**, *1*, 48.
8. Hacquard, G.; *Dicionário de mitologia grega e romana*; Lopes, M. H. T., trad.; 1^a ed., Edições Asa: Porto, 1996.
9. Liang, D.; *Introduction to Java programming*, 10th ed., Boston: Prentice Hall, 2014.
10. Shelby, J. E.; *Introduction to glass science and technology*, 2nd ed., Cambridge: The Royal Society of Chemistry, 2005.
11. Kenkel, J.; *Analytical chemistry for technicians*, 4th ed., Boca Raton: CRC Press, 2013.
12. Lide, D. R.; *Handbook of chemistry and physics*, 88th ed., Boca Raton: CRC Press, 2007.