

## Pesquisa FAPESP

Edição 103 - Setembro 2004

Linha de Produção

# Equação prevê bilhões de vidros

Uma parte considerável da comunidade científica e tecnológica acredita que estão esgotadas as novas formulações de vidros, materiais também chamados de não-cristalinos. Mas um trabalho dos professores Edgar Dutra Zanotto e Francisco Antônio Bezerra Coutinho, coordenadores adjuntos das áreas de ciências exatas e tecnologia da diretoria científica da FAPESP, mostra, de forma teórica, que ainda há bilhões de possibilidades para o desenvolvimento de novos materiais vítreos.

A partir de 80 elementos químicos registrados na tabela periódica, que podem ser manipulados para a formulação de vidros, eles elaboraram uma equação que prevê o número fantástico de 1058 possíveis formulações. "Isso se considerarmos composições que apresentem apenas variações de 1% em 1%, como por exemplo um vidro com 1% de sódio e 99% de silício e, na seqüência, 2% de sódio, 98% de silício etc.", explica Zanotto, professor do Departamento de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de São Carlos.

"Se usarmos variações de 0,1%, teremos um número de composições maior que 10300", diz Coutinho, do Departamento de Informática da Faculdade de Medicina da Universidade de São Paulo. O trabalho foi aceito para publicação na revista *Journal of Non-Crystalline Solids*. "Comecei a pensar nessa pesquisa depois de participar de recentes congressos sobre materiais não-cristalinos", conta Zanotto.

"Apesar de existirem mais de 200 mil materiais desse tipo registrados e outros milhares que são sigilosos em empresas e laboratórios pelo mundo, mostramos que o assunto está muito longe de ser esgotado. Com isso, sugerimos um amplo uso de simulações computacionais, em vez de experimentações puras que testam pequenas parcelas entre todas as possíveis formulações", diz o professor Zanotto.