

REALIZAÇÃO DE UM MODELAMENTO MATEMÁTICO ATRAVÉS DA VARIAÇÃO DE TEMPERATURA EM RESINAS COMPOSTAS FOTOPOLIMERIZÁVEIS DURANTE O PROCESSO DE FOTOPOLIMERIZAÇÃO

Ingrid Solange Sepúlveda Muñoz¹, Alberto José Carvalho Martins Motta¹, Márcio Magini², Maira Regina Rodrigues Magini², Renata Amadei Nicolau¹, Marcos Tadeu Tavares Pacheco¹.

¹Universidade do Vale do Paraíba (UNIVAP), Instituto de Pesquisas e Desenvolvimento (IP&D). Avenida Shishima Hifumi, 2911-Urbanova CEP 12244-000-São José dos Campos-SP, ingrid@univap.br

²Universidade do Vale do Paraíba (UNIVAP), Laboratório de Biopolímeros e Fotoquímica (IP&D); Laboratório de Matemática Biológica, Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia. Avenida Shishima Hifumi, 2911-Urbanova CEP 12244-000-São José dos Campos-SP, magini@univap.br

Resumo- Este trabalho demonstra, através de dados experimentais resultantes de experimentos realizados em laboratório específico, uma aproximação por modelamento matemático do comportamento físico-químico, mais especificamente da variação temperatura, durante o tempo de fotopolimerização de Resinas Compostas Fotopolimerizáveis. Realizou-se as medições da variação de temperatura através do sensor de temperatura, durante todo o processo em cadências, com períodos fixos de 4 segundos. O experimento repetiu-se por três vezes, a fim de obter um padrão de comparação para os dados coletados, realizou-se o experimento por mais três vezes sem o uso da resina composta, onde se utilizou apenas o papel alumínio sobre o sensor de temperatura. Realizou-se a coleta de dados experimentais, através do tempo e temperatura, e obteve-se valores dos coeficientes encontrados através do polinômio, o qual gerou uma curva experimental e comparou-se com a curva teórica. Concluiu-se com o presente estudo um modelo matemático que simule o comportamento da variação de temperatura de resinas compostas fotopolimerizáveis durante o processo de fotopolimerização.

Palavras-chave: Resinas Compostas, Fotopolimerização, Modelo Matemático.

Área do Conhecimento:

Introdução

Uma área em desenvolvimento hoje no setor industrial é a Fotoquímica de polímeros, pois engloba não só fatores econômicos, como técnicos e ecológicos, buscando um sistema livre de solventes orgânicos, de baixo custo energético e aplicação rápida até mesmo em temperatura ambiente (RODRIGES, 2003).

Alguns autores dividem a Fotoquímica de polímeros em três grandes grupos: Reações de Síntese (CATALINA 1982; HODGE 1980), FOTODEGRADAÇÃO/FOTOESTABILIZAÇÃO (RANDY 1975; CATALINA 1991) e fotopolimerização/fotocura (ALLEN 1989; PAPPAS 1978).

O setor de Fotopolimerização ganha uma atenção especial devido às inúmeras e importantes aplicações na área de Materiais, principalmente na área da Saúde.

Esta a Odontologia ganha uma grande atenção pelo uso das resinas Fotopolimerizáveis como material restaurador para dentes anteriores e posteriores. Esta resina foi desenvolvida para suprir as deficiências dos sistemas por polimerização química, na qual não tinha o

controle da temperatura da reação (BARATIERI 1995; DIETLIKER 1991).

As resinas ativadas por luz visível, com o comprimento de onda na faixa entre 400 nm a 500 nm (BENÍCIO et al 2007), iniciam o processo de polimerização através da absorção de luz de um iniciador, geralmente uma α -dicetona, que uma vez ativado reage com um agente redutor, amina alifática, para produzir radicais livres. A partir disso ocorre à polimerização dos monômeros metacrílicos que formam uma matriz polimérica com ligações cruzadas (BARATIERI 1995; DIETLIKER 1991).

Para tanto, este processo necessita de um período de tempo para ser realizado e provoca mudanças físico-químicas no material da resina, ocasionando-se também variações de temperatura no mesmo material.

Este trabalho demonstra, através de dados experimentais resultantes de experimentos realizados em laboratório específico, uma aproximação por modelamento matemático do comportamento físico-químico, mais especificamente da variação temperatura, durante o tempo de fotopolimerização de Resinas Compostas Fotopolimerizáveis.

O objetivo deste estudo foi criar um modelo matemático que simule o comportamento da variação de temperatura de resinas compostas fotopolimerizáveis durante o processo de fotopolimerização.

Metodologia

Dividiu-se o presente trabalho em duas etapas, obteve-se primeiro a aquisição de dados experimentais do processo de fotopolimerização de resinas compostas, e na segunda etapa criou-se uma aproximação matemática do processo, através dos dados adquiridos experimentalmente.

Foi utilizada a Resina Posterior Condensável, Cor A2, 4 gramas, Dentsply Caulk, a qual se dividiu em três porções de 0,2 g, através da balança analítica AND (figura 1).



Figura 1: Balança de precisão com as resinas compostas

Cada pequena porção de resina foi moldada para adquirir um mesmo formato físico, colocando-se uma base de papel alumínio, em seguida a resina já no peso ideal, e duas lâminas paralelas. Com o auxílio de um bastão de vidro moldou-se a resina (figura 2).

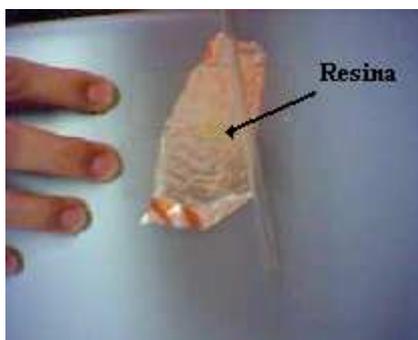


Figura 2 – Forma de modelamento da resina composta

Envolveu-se previamente a resina composta por papel alumínio e colocou-se diretamente no sensor de temperatura (figura 3), onde se iniciou a fotopolimerização com o

fotopolimerizador kavo (37-34); ultra blue. modelo 600 mw. faixa 420 e 520 nm.

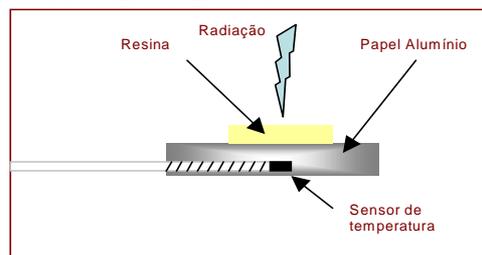


Figura 3: Esquema de montagem da resina em volta do sensor de temperatura.

Simultaneamente ao processo de fotopolimerização da resina, foi cronometrado o tempo (figura 4).



Figura 4 – Processo de fotopolimerização da resina e medição da variação de temperatura com o sensor de temperatura.

Realizou-se as medições da variação de temperatura através do sensor de temperatura, durante todo o processo em cadências, com períodos fixos de 4 segundos. O experimento repetiu-se por três vezes como descrito anteriormente, a fim de obter um padrão de comparação para os dados coletados, realizou-se o experimento por mais três vezes sem o uso da resina composta, onde se utilizou apenas o papel alumínio sobre o sensor de temperatura.

Realizou-se a coleta de dados experimentais, através do tempo e temperatura.

Após a coleta, os dados foram dispostos seqüencialmente em planilhas de tabelas, onde criou-se gráficos com curvas independentes de cada experiência realizada. Como os gráficos mostravam curvas com características muito aproximadas, foi realizada uma média estatística para cada caso resultando em apenas duas curvas médias finais: uma para o caso da medição da temperatura do processo de fotopolimerização com a resina e outro para o caso da medição feita sem a resina apenas com o papel alumínio.

Resultados

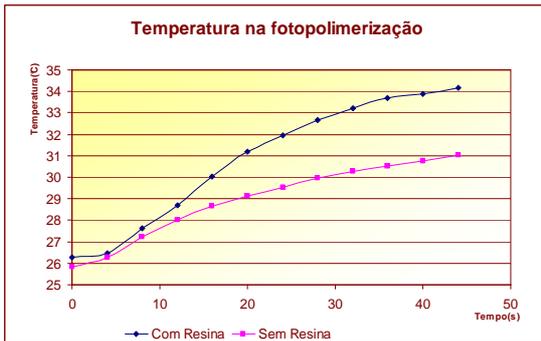


Figura 5: Curvas dos valores obtidos através das medidas das temperaturas.

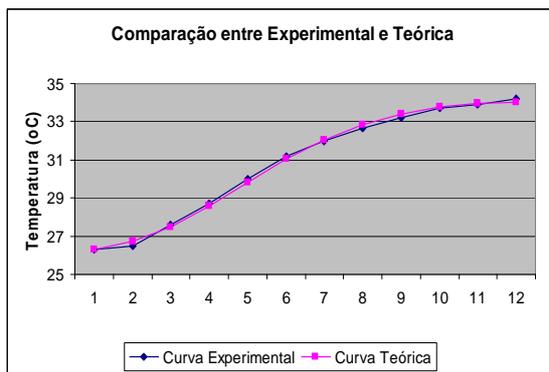


Figura 6: Comparação entre a curva experimental e curva teórica.

Tabela 1: valores obtidos dos coeficientes encontrados através do polinômio:

| Sem Resina | Com Resina |
|---------------------|--------------------|
| a0 = 25,8300 | a0 = 26,275 |
| a1 = 0,9124 | a1 = 26,475 |
| a2 = 0,0051 | a2 = 31,950 |
| a3 = -0,0001 | a3 = 34,175 |

Discussão

Com os dados adquiridos no presente estudo, obteve-se resultados, mostrando-se curvas com características muito aproximadas como pode ser observado na figura 6 (SCHAUM). Foi realizada uma média estatística (CHOW) para cada caso resultando em apenas duas curvas médias finais: uma para o caso da medição da temperatura do processo de fotopolimerização com a resina e o outro para o caso da medição feita sem a resina apenas com o papel alumínio (figura 5).

A partir da primeira etapa do estudo, analisou-se as curvas apresentadas no gráfico, e tomou-se como ponto inicial o polinômio:

$$P_3(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3$$

Através deste polinômio chegou-se ao modelamento matemático do processo. Com o auxílio do computador e através do uso de um software *MatLab* pôde-se calcular os coeficientes (A0 a A3) do polinômio acima citado.

Utilizou-se estes dados, estabeleceu-se um modelamento matemático aproximado do processo, sendo ele:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{T(t)}{t^2 + A} + K$$

Interpondo-se os processos de modelamento matemático, com os dados adquiridos, obteu-se:

$$T_{(m+1)} \cong T_{(m)} + h \left(\frac{T_{(m)}}{t^2 + A} + K \right)$$

Sendo : h= passo;
(tn + 1) = (tn + h);

Onde, A e K são constantes e foram caracterizadas por polinômios matemáticos definidos através do processo de interpolações:

$$A \cong \frac{1,49\alpha^4 - 3,95\alpha^3 + 5,3\alpha^2 + 0,3\alpha + 12}{\alpha^2}$$

$$K \cong 1 - 0,4\alpha$$

$$\alpha \cong tn$$

Substituiu-se os valores acima citados ao novo polinômio, chegou-se, então, ao modelamento matemático final:

$$T_{(m+1)} \cong T_{(m)} + h \cdot \left(\frac{T_{(m)} \cdot tn^2}{2,49tn^4 - 3,95tn^3 + 5,3tn^2 + 0,3tn + 12} - 0,4tn + 1 \right)$$

Pode-se observar que na curva modelada deste experimento, a constante A tem uma influência na sua angulação. Influenciando assim a parte medial da curva. Já a constante K influencia, na maior parte, no final da curva onde a curva tende a um limite superior, tendendo-se a transformar-se em constante.

Conclusão

Concluiu-se com o presente estudo um modelo matemático que simule o comportamento da variação de temperatura de resinas compostas fotopolimerizáveis durante o processo de fotopolimerização.

Agradecimentos

Os autores agradecem a colaboração da CAPES/PROSUP (Bolsa), pelo apoio a esta pesquisa.

Referências

- Allen, N.S. - "Photopolymerization and Photoimaging Science and Technology", *Elsevier Applied Science*, England, (1989).
- Baratieri, L.B. - "Estética- Restaurações Adesivas Diretas em Dentes Anteriores Fraturados", Santos Livraria Editora - *Quintessence Books* - São Paulo, (1995).
- Catalina, F.; Allen, N.S. & Chirinos-Padron, A. - *Rev. Plást. Mod.*, 415, p.99, (1991).
- [1] Neumann, M.G. & Rodrigues, M.R. - *J. Braz. Chem. Soc.*, 14, p.76 (2003).
- Catalina, F.; Martinez-Utrilla, R. & Sastre - R., *Polym. Bull.*, 8, p.369, (1982).
- Chow, Cecil; Caldas, Iberê L., Okuno, Emico; Física para Ciências Biológicas e Biomédicas; editora *Harbra*.
- Dietliker, R.K. - "Chemistry and Technology of UV and EB Formulation for Coating, Inks, and Paints", v.3, *SITA Technology Ltd.*, London, (1991).
- Felipe Gomes Benício, M. T. T. Pacheco, M. R. Rodrigues, A. B. Villaverde, E. Munin, L. Silveira Jr. , R. A. Zângaro. Near Infrared Raman Spectroscopy System for Real Time Monitoring of Fast Processes: A Resin Composite Photopolymerization Application. *Instrumental Science and Technology*, 35: 609-617, 2007.
- Hodge, P. & Sherrington, D.C. - "Polymer Supported Reactions in Organic Synthesis", *John Wiley*, Chichester, (1980).
- Pappas, P. - "UV Curing Science and Technology", *Technology Marketing Corp.*, Connecticut, USA, (1978).
- Randy, B. & Rabek, J.F. - "Photodegradation, Photooxidation and Photostabilization of Polymers", *John Wiley*, London, (1975).
- Schaum, Murray R. Spiegel; Manual de Fórmulas, métodos e Tabelas de Matemática, 2ª. edição; editora *Makron Books*.