

Sumário

I	Introdução	3
1	Surfactantes	5
1.1	Polaridade	5
1.2	Parâmetro de empacotamento	5
1.3	Mesofases	5
1.4	Aditivos	5
2	Micelas gigantes	7
2.1	Crescimento de micelas	7
2.2	Termodinâmica de micelas	7
2.3	Modelos de comportamento reológico	7
2.4	Perfis de viscosidade	7
3	Inspirações para o projeto	9
4	Estudos de Hoffmann sobre micelas e lamelas	11
5	Estudos de Pedersen sobre cinética	13
6	Objetivos	15
II	Teoria	17
7	Reologia	19
7.1	Fundamentos	19
7.1.1	Fluidos Newtonianos	19
7.1.2	Sólidos Hookeanos	19
7.1.3	Fluidos viscoelásticos	19
7.2	Reologia oscilatória	19
7.2.1	Aquisição de dados	19
7.2.2	Modelo de Maxwell	19
7.2.3	Modelos mais complexos	19
7.3	Curvas de Fluxo	19
7.3.1	Modelos de curvas de fluxo	19
8	Calorimetria de titulação isotérmica	21
8.1	Fundamentos	21
8.1.1	Aquisição de dados	21
8.2	Calorimetria de micelas esféricas	21

8.3	Calorimetria de micelas gigantes	21
8.4	Termodinâmica de micelização	21
9	SAXS	23
9.1	Fundamentos	23
9.2	Modelagem	23
9.2.1	Esferas	23
9.2.2	Micelas esféricas	23
9.2.3	Micelas gigantes	23
9.2.4	Visualização dos parâmetros	23
9.2.5	Indexação de picos	23
10	Fluorescência	25
10.1	Fundamentos	25
10.1.1	Diagramas	25
10.1.2	Rendimento quântico	25
11	Análise Multivariada	27
11.1	Técnicas de classificação	27
11.1.1	Normalização dos dados	27
11.1.2	PCA	27
11.1.3	HCA	27
11.2	Técnicas de regressão	27
11.2.1	Regressão Multivariada	27
11.2.2	PCR	27
11.2.3	PLS	27
III	Materiais e Métodos	29
12	Reagentes	31
13	Reologia	33
13.1	Preparo das amostras	33
13.2	Tratamento de dados de reologia oscilatória	33
13.3	Tratamento de dados de curvas de fluxo	33
14	Calorimetria de titulação isotérmica	35
14.1	Preparo das amostras	35
14.2	Tratamento de dados	35
15	SAXS	37
15.1	Aquisição de dados	37
15.1.1	LNLS	37
15.1.2	Grenoble	37
15.1.3	Stopped-flow	37
15.2	Tratamento de dados	37
15.2.1	Subtração do “branco”	37
15.2.2	Média das curvas de cinética	37
15.2.3	Ajuste das curvas pelo software superSAXS	37

16 Fluorescência	39
16.1 Aquisição de dados	39
16.1.1 Determinação da absorção e emissão	39
16.1.2 Fluorescência estática	39
16.1.3 Fluorescência resolvida no tempo	39
16.2 Tratamento de dados	39
16.2.1 Filtro Savitzky-Golay	39
17 Técnicas adicionais	41
17.1 Calorimetria diferencial de varredura	41
17.2 Espalhamento dinâmico de luz	41
17.3 Tensiometria	41
IV Efeito dos aditivos hidrofílicos	43
18 Resultados	45
18.1 Efeitos dos aditivos na reologia	45
18.1.1 Glicerina	45
18.1.2 Sacarose	45
18.1.3 DMSO	45
18.1.4 1,3BD	45
18.1.5 Ureia	45
18.2 Efeito dos aditivos na calorimetria de micelas gigantes	45
18.3 Efeito dos aditivos na calorimetria de micelização	45
19 Parâmetros a ser estudados	47
19.0.1 Índice de refração	47
19.0.2 Constante dielétrica	47
19.0.3 Parâmetro de Gordon	47
19.0.4 Interação dos aditivos com a superfície micelar	47
19.0.5 Decomposição em propriedades fundamentais	47
20 Correlações entre os parâmetros e as propriedades	49
20.0.1 Reologia	49
20.0.2 Calorimetria	49
21 Efeito da Ureia	51
21.1 Calorimetria diferencial de varredura	51
21.2 SAXS	51
21.3 DLS	51
21.4 Reologia do sólido	51
21.5 Entalpia de interação de ureia com surfactante	51
V Cinética de crescimento	53
22 SAXS resolvido no tempo	55
23 Fluorescência resolvida no tempo	57

VI	Projetos menores	59
24	Estudo sobre regiões Maxwellianas nos perfis de viscosidade	61
25	Comparação de ITC de MG em dois sentidos opostos	63
VII	Contribuições para outros projetos	65
26	Muco	67
26.1	Breve descrição do projeto	67
26.2	Contribuição	67
26.2.1	Determinação de uma metodologia	67
26.2.2	Tratamento de dados	67
26.3	Resultado da colaboração	67
27	Previsão de temperaturas de fusão de triacilglicerídeos	69
27.1	Breve descrição	69
27.2	Contribuição	69
VIII	Anexos	71
28	Instalação e uso de Python	73
28.1	Curso de Python	73
29	Descrição extensa do modelo de SAXS de micelas gigantes	75
30	Descrição e uso do software de tratamento de curvas de fluxo	77
31	Softwares miscelâneos para tratamento de dados	79
	Elaboração geral das áreas e conteúdo da tese.	

Parte I

Introdução

Capítulo 1

Surfactantes

1.1 Polaridade

1.2 Parâmetro de empacotamento

1.3 Mesofases

1.4 Aditivos

Capítulo 2

Micelas gigantes

2.1 Crescimento de micelas

2.2 Termodinâmica de micelas

2.3 Modelos de comportamento reológico

2.4 Perfis de viscosidade

Capítulo 3

Inspirações para o projeto

Capítulo 4

Estudos de Hoffmann sobre micelas e lamelas

Capítulo 5

Estudos de Pedersen sobre cinética

Capítulo 6

Objetivos

Parte II

Teoria

Capítulo 7

Reologia

7.1 Fundamentos

7.1.1 Fluídos Newtonianos

7.1.2 Sólidos Hookeanos

7.1.3 Fluidos viscoelásticos

7.2 Reologia oscilatória

7.2.1 Aquisição de dados

7.2.2 Modelo de Maxwell

7.2.3 Modelos mais complexos

7.3 Curvas de Fluxo

7.3.1 Modelos de curvas de fluxo

Capítulo 8

Calorimetria de titulação isotérmica

8.1 Fundamentos

8.1.1 Aquisição de dados

8.2 Calorimetria de micelas esféricas

8.3 Calorimetria de micelas gigantes

8.4 Termodinâmica de micelização

Capítulo 9

SAXS

9.1 Fundamentos

9.2 Modelagem

9.2.1 Esferas

9.2.2 Micelas esféricas

9.2.3 Micelas gigantes

9.2.4 Visualização dos parâmetros

9.2.5 Indexação de picos

Capítulo 10

Fluorescência

10.1 Fundamentos

10.1.1 Diagramas

10.1.2 Rendimento quântico

Lei de X (não importa onde incide para fluorescência)

Capítulo 11

Análise Multivariada

11.1 Técnicas de classificação

11.1.1 Normalização dos dados

11.1.2 PCA

11.1.3 HCA

11.2 Técnicas de regressão

11.2.1 Regressão Multivariada

11.2.2 PCR

11.2.3 PLS

Parte III

Materiais e Métodos

Capítulo 12

Reagentes

Capítulo 13

Reologia

13.1 Preparo das amostras

13.2 Tratamento de dados de reologia oscilatória

13.3 Tratamento de dados de curvas de fluxo

Capítulo 14

Calorimetria de titulação isotérmica

14.1 Preparo das amostras

14.2 Tratamento de dados

Capítulo 15

SAXS

15.1 Aquisição de dados

15.1.1 LNLS

15.1.2 Grenoble

15.1.3 Stopped-flow

15.2 Tratamento de dados

15.2.1 Subtração do “branco”

15.2.2 Média das curvas de cinética

15.2.3 Ajuste das curvas pelo software superSAXS

Capítulo 16

Fluorescência

16.1 Aquisição de dados

16.1.1 Determinação da absorção e emissão

16.1.2 Fluorescência estática

16.1.3 Fluorescência resolvida no tempo

Programa LabView

16.2 Tratamento de dados

16.2.1 Filtro Savitzky-Golay

Capítulo 17

Técnicas adicionais

17.1 Calorimetria diferencial de varredura

17.2 Espalhamento dinâmico de luz

17.3 Tensiometria

Parte IV

Efeito dos aditivos hidrofílicos

Capítulo 18

Resultados

18.1 Efeitos dos aditivos na reologia

18.1.1 Glicerina

18.1.2 Sacarose

18.1.3 DMSO

18.1.4 1,3BD

18.1.5 Ureia

18.2 Efeito dos aditivos na calorimetria de micelas gigantes

18.3 Efeito dos aditivos na calorimetria de micelização

Capítulo 19

Parâmetros a ser estudados

19.0.1 Índice de refração

19.0.2 Constante dielétrica

19.0.3 Parâmetro de Gordon

19.0.4 Interação dos aditivos com a superfície micelar

19.0.5 Decomposição em propriedades fundamentais

Capítulo 20

Correlações entre os parâmetros e as propriedades

20.0.1 Reologia

20.0.2 Calorimetria

Capítulo 21

Efeito da Ureia

21.1 Calorimetria diferencial de varredura

21.2 SAXS

21.3 DLS

21.4 Reologia do sólido

21.5 Entalpia de interação de ureia com surfactante

Parte V

Cinética de crescimento

Capítulo 22

SAXS resolvido no tempo

Capítulo 23

Fluorescência resolvida no tempo

Parte VI

Projetos menores

Capítulo 24

Estudo sobre regiões Maxwellianas nos perfis de viscosidade

Capítulo 25

Comparação de ITC de MG em dois sentidos opostos

Parte VII

Contribuições para outros projetos

Capítulo 26

Muco

26.1 Breve descrição do projeto

26.2 Contribuição

26.2.1 Determinação de uma metodologia

26.2.2 Tratamento de dados

26.3 Resultado da colaboração

Capítulo 27

Previsão de temperaturas de fusão de triacilglicerídeos

27.1 Breve descrição

27.2 Contribuição

Parte VIII

Anexos

Capítulo 28

Instalação e uso de Python

28.1 Curso de Python

Capítulo 29

Descrição extensa do modelo de SAXS de micelas gigantes

Capítulo 30

Descrição e uso do software de tratamento de curvas de fluxo

Capítulo 31

Softwares miscelâneos para tratamento de dados