

Determinação da composição de nanopartículas bimetálicas AuAg usando espectroscopia UV-vis e calibração multivariada

Isadora Dantas Costa (IC)^{*}, Kássio M. G. Lima (PQ), Luiz H. S. Gasparotto (PQ).

Grupo de Química Biológica e Quimiometria, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Av. Senador Salgado Filho 3000, Lagoa Nova, Campus Universitário, CEP 59078-970 – Natal/RN

*isadora-dantas@hotmail.com

Palavras Chave: nanopartículas bimetálicas, ouro, prata, MLR.

Introdução

Nanopartículas de metais nobres têm sido alvo de intenso estudo por suas potenciais aplicações em fotônica, eletrocatalise e terapia do câncer (1). No caso de nanopartículas multimetálicas, a composição também influencia as propriedades de interesse (2). A composição pode ser determinada, por exemplo, via EDX ou ICP, técnicas essas nem sempre de fácil acesso.

Neste trabalho foram desenvolvidos modelos de calibração multivariada usando a regressão linear múltipla (RLM), a partir dos espectros UV-vis individuais de nanopartículas em distintas frações molares de Au/Ag para determinação da composição de tais partículas.

Experimental

As seguintes soluções estoque foram preparadas: AgNO_3 0,010 mol L^{-1} , AuCl_3 0,010 mol L^{-1} , PVP 80 g L^{-1} e NaOH/glicerol 1,0 mol L^{-1} cada. Para a síntese de, por exemplo, nanopartículas AuAg de razão molar 50/50, em um béquer adicionaram-se 0,10 mL da solução de AgNO_3 , 1,25 mL da solução de PVP, 0,10 mL da solução de AuCl_3 , e 7,55 mL de água deionizada e homogeneizou-se. Adicionaram-se então 1 mL da solução de NaOH/glicerol . Para síntese de AuAgNPs de outras composições ajustam-se apenas os volumes de AgNO_3 e AuCl_3 . Espectros de UV-vis foram adquiridos com um equipamento Evolution 60S. Todos os espectros foram exportados para MATLAB versão 7.10 (The Math-Works, Natick, USA). Os modelos RLM (matriz 11×251) foram desenvolvidos usando o PLS-toolbox (Eigenvector Research, Inc., Wenatchee, WA, USA, version 7.51)

Resultados e Discussão

A Fig. 1A apresenta espectros de UV-vis das AuAgNPs. O espectro para nanopartícula de prata pura apresenta um máximo em 410 nm e se desloca para maiores comprimentos de onda com o aumento da concentração de ouro, até atingir o perfil das nanopartículas de ouro puro, centrado em 530 nm. O inset da Fig. 1 mostra a mudança de cor das soluções com o aumento da concentração de ouro. Essa mudança espectral permite o uso do MLR

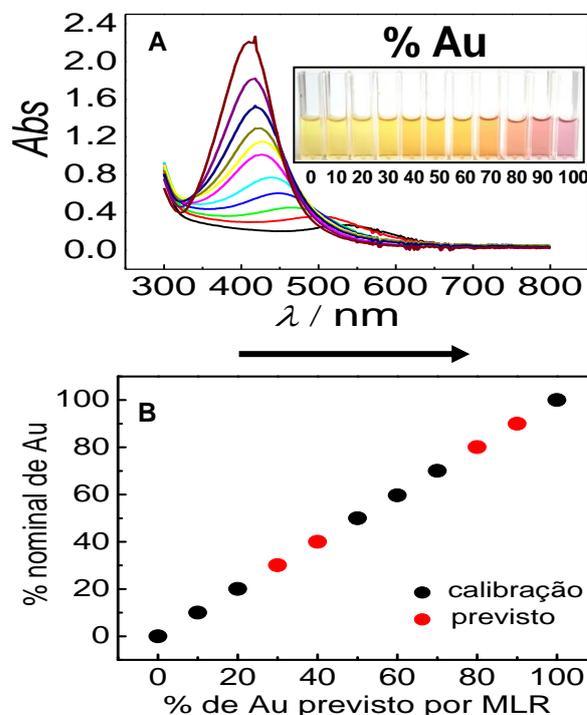


Figura 1. (A) Espectros de UV-vis de nanopartículas bimetálicas AuAg com diferentes frações molares de Au. (B) Regressão e validação externa da fração molar de ouro.

para correlação do perfil do espectro com a respectiva composição. A Fig.1B mostra que o modelo RLM desenvolvido neste trabalho apresenta uma elevada correlação (> 0.99) e baixos erros estimados entre os valores experimentais e os previstos. O erro relativo para as amostras de previsão foi inferior a 0,05% mostrando que a composição de nanopartículas multimetálicas pode ser estimada a partir da união entre espectros UV-vis e RLM como método de calibração multivariada.

Conclusões

A composição de AuAgNPs pode ser determinada através da espectroscopia UV-Vis e RLM.

Agradecimentos

CNPq (471794/2012-0) e PROPESQ-UFRN

¹ Daniel, Marie-Christine; Astruc, D. *Chem Rev.* **2004**, *104*, 293.

⁴ Link, S.; Wang, Z.L.; El-Sayed, A.A. *J Phys Chem.* **1999**, *103*, 3529.