

Funcionalização do oxidróxido de ferro δ -FeOOH: Um estudo teórico-experimental

Silviana Corrêa¹(PG), Maíra S. Pires¹ (PG), Telles C. Silva¹ (PG), Alexandre A. Castro¹ (PG), Marcus V. J. Rocha²(PG), Eduardo P. da Rocha¹ (PG), Elaine F.F. da Cunha¹(PQ), Teodorico C. Ramalho¹(PQ)*

¹Universidade Federal de Lavras. Departamento de Química, Universidade Federal de Lavras, 37.200-000. Lavras-MG – Brasil. ² Vrije Universiteit Amsterdam (Vrije Universiteit Amsterdam, Faculty of Science, Division of Theoretical Chemistry. De Boelelaan, 1083. 1081HV, Amsterdam, Netherlands

Palavras Chave: material híbrido, PMMA, óxido de ferro

Introdução

Os materiais híbridos são de grande interesse nas aplicações comerciais, devido às suas propriedades diferenciadas, que resultam da combinação entre a estabilidade térmica e química dos componentes inorgânicos, e a processabilidade e flexibilidade de polímeros orgânicos. O desenvolvimento de híbridos baseados em PMMA (polimetilmetacrilato) e óxidos de ferro têm levado à nanomateriais que possuem aplicações biomédicas. Por exemplo, microesferas de óxido de ferro têm sido utilizadas nos tratamentos de hipertermia em pacientes com câncer.¹ Tendo em vista este cenário, o objetivo do trabalho é sintetizar um novo material híbrido, PMMA/ δ -FeOOH, avaliando suas propriedades espectroscópicas e estruturais.

Metodologia

O híbrido foi obtido experimentalmente através da funcionalização das partículas de δ -FeOOH com TMSM (trimetóxisililpropilmetilmetacrilato), 500mg das partículas foram dispersas em 2,6mL de TMSM, e agitadas em banho de ultrassom por 24 horas a 55°C. Por último, foram lavadas com Tolueno e secas a 50°C durante 24 horas. O material foi caracterizado por Espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier (FTIR). Os cálculos teóricos de superfície de energia potencial (SEP) foram realizados em condições periódicas de contorno no módulo BAND do programa ADF (Amsterdam Density Functional) no nível PBE/TZP. Uma análise PCA foi feita para interpretação dos resultados.²

Resultados e Discussão

Os espectros de IV foram obtidos para os materiais δ -FeOOH (puro) e δ -FeOOH/TMSM (Figura 1). No espectro da ferroxita funcionalizada a banda em 1096 cm^{-1} é atribuída às ligações covalentes do Si-O-Fe. A funcionalização ocorre com a formação da ligação Si-O-Fe. O desaparecimento da ligação Fe-O-H em 908 cm^{-1} no espectro de infravermelho do δ -FeOOH/TMSM também é mais uma evidência da formação do material híbrido.

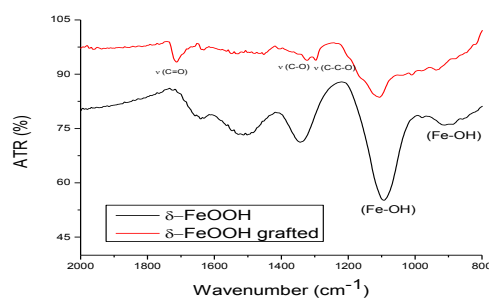


Figura 1. Espectro de IV para δ -FeOOH e δ -FeOOH/TMSM.

Para construção da SEP (Figure 2) foram selecionados pontos utilizando o Planejamento Fatorial Tipo Estrela, sendo o ponto central a interseção dos ângulos 130, 130 em relação ao PMMA com a superfície do óxido.

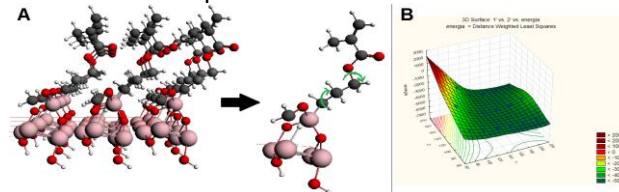


Figura 2. PMMA/ δ -FeOOH (A); Gráfico de superfície de energia potencial (B).

O ponto de menor energia é marcado pelos ângulos (155, 130). Isso define qual é a estrutura mais estável do híbrido. Os valores de frequências vibracionais para os mínimos de energia obtidos pela SEP estão em boa concordância com os experimentais.

Conclusões

No espectro de IV, observa-se a formação da banda que confirma a funcionalização do óxido de ferro, e nos cálculos o valor da energia de formação diminui para o óxido funcionalizado, confirmando a formação do material.

Os resultados de PES permitiram a identificação de mínimos de energia para o híbrido PMMA/ δ -FeOOH. O cálculo teórico de IV está em boa concordância com os valores experimentais.

Agradecimentos

À CAPES, CNPq e à UFLA pelos auxílios financeiros e de infraestrutura para a realização do trabalho.

¹ Kawashita, M. et al. *J. Mater. Sci: Mater. Med.* **2008**, 19, 1897.

² Rocha, M. V. J. et al. *Spect. Acta A: Mol. Biom. Spect.* **2014**, 117, 276-283.