

Interação de nanotubos de carbono com hidroxiapatita carbonatada

Friday 2 December 2016 15:30 (15 minutes)

Um das características a serem alcançadas pelos biomateriais é possuir semelhança com o material hospedeiro. Em casos de substituição óssea, na qual os ossos apresentam alta resistência mecânica e uma ordem de grandeza nanométrica é importante que o material a ser usado apresente estas características.

Assim, a interação entre estes materiais é favorecida diminuindo o tempo de recuperação do paciente assim como as possíveis complicações clínicas. A hidroxiapatita $Ca_{10-x}(PO_4)_{6-x}(CO_3)_x(OH)_{2-x}$ (HAC) apresenta tanto em composição quanto em ordem de grandeza semelhanças consideráveis em relação ao osso humano,

porém a mesma mostra-se com baixa resistência mecânica, o que em muitas vezes dificulta sua aplicação em áreas que apresentam esforço mecânico elevado. Já os nanotubos de carbono apresentam baixa densidade e forte ligação covalente entre seus átomos, o que confere alta resistência mecânica ao material.

Por tal motivo foram estudadas por meio de simulação computacional a influência dos nanotubos de carbono (CNT), de parede única puros e funcionalizados com agrupamentos orgânicos carboxila (CNTs-COOH) e hidroxila (CNTs-OH) para concentrações de (5, 10, 15, 20 e 25%), na estrutura da hidroxiapatita. Foram realizados testes experimentais sintetizando a hidroxiapatita com ~1% de CNTs puro e funcionalizado. Os estudos computacionais foram feitos utilizando dinâmica de rede onde basicamente se resolvem as equações de movimento para todo o sistema.

Na parte experimental as sínteses foram feitas pelo método de precipitação aquosa de $[(NH_4)_2 + (NH_4)_2CO_3] + Ca(NO_3)_2$ acrescentando-se ~1% CNTs em relação a massa HAC obtida. As amostras foram caracterizadas por difração de raio x (DRX), Análise Termogravimétrica (TG/DTA) e espectroscopia na região do infravermelho (IV). Como esperado, a dinâmica de rede mostrou que os CNTs puros apresentam uma menor interação com a hidroxiapatita. Já os CNTs funcionalizados com os agrupamentos OH e COOH interagiram melhor com a matriz da hidroxiapatita. O cálculo do Bulk Modulus mostrou que as funcionalizações de 15% de OH e COOH forneceram maior rigidez, enquanto as de 10% OH e 20% COOH resultaram mais vulneráveis às deformações. Os resultados de DRXs mostraram que as amostras apresentaram pouca cristalinidade, com tamanho médio aparente de cristalito de ~20 Å, confirmando a ordem nanométrica das mesmas. Os resultados de DRX, TG/DTA e IV mostraram que os CNTs puros aparentemente não afetaram a estrutura da HAC. Porém, por DRX foi observado que os CNTs funcionalizados com agrupamentos COOH podem ter interagido com a HAC, devido ao deslocamento em alguns picos, provocando uma diminuição no eixo c, direção preferencial de crescimento para este material. Os espectros de infravermelho mostraram os modos vibracionais correspondentes ao íon carbonato, sugerindo a presença destes íons nos sítios A e B da hidroxiapatita. Conclusão: Foi realizada a dinâmica de rede para todas as estruturas propostas e as propriedades mecânicas indicam que os sistemas com 15% OH e 15% COOH foram os mais rígidos. Foi obtida a HAC nano ~20 Å contendo ~1% de CNTs puro e funcionalizado com agrupamentos COOH. Os DRXs indicaram pouca cristalinidade (ordem nanométrica) das amostras, contendo grande quantidade de material amorfo. Com a espectroscopia na região do infravermelho identificamos os grupos funcionais das HACs, onde o íon CO_3^{2-} ocuparam os sítios A e B nas amostras. Porém com as condições utilizadas nas medidas de IV não identificamos os modos vibracionais dos CNTs.

Tipo de Apresentação

Oral

Author: KNUPP, Wanderson

Presenter: KNUPP, Wanderson

Session Classification: Comunicações Oraís II

Track Classification: Comunicações Orais II