

Pricilla de Oliveira Henz; Vladimir Lavayen*

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, BR-91501970, Porto Alegre-RS, Brasil. [*vladimir.lavayen@ufrgs.br](mailto:vladimir.lavayen@ufrgs.br)

INTRODUÇÃO

Numerosos óxidos metálicos, de grande importância científica e técnica, são essencialmente substâncias iônicas. Sobressaem as nanopartículas de óxido de ferro em suas fases magnetita ($\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+}_2\text{O}_4$) e hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$), que são considerados entre os melhores candidatos para diagnóstico médico, como agentes de contraste em imagiologia, catálise, além atuar como cargas inorgânicas nos nanocompósitos^{1,2,4}.

OBJETIVO

Neste trabalho se estuda a correlação dos dados espectroscópicos e estruturais de partículas de óxido de ferro < 60 nm, sintetizadas pelo método de co-precipitação.

METODOLOGIA

A metodologia seguida é uma modificação do método originalmente proposto por Qu e colaboradores em 1999¹ e pode ser observada na Figura 1.

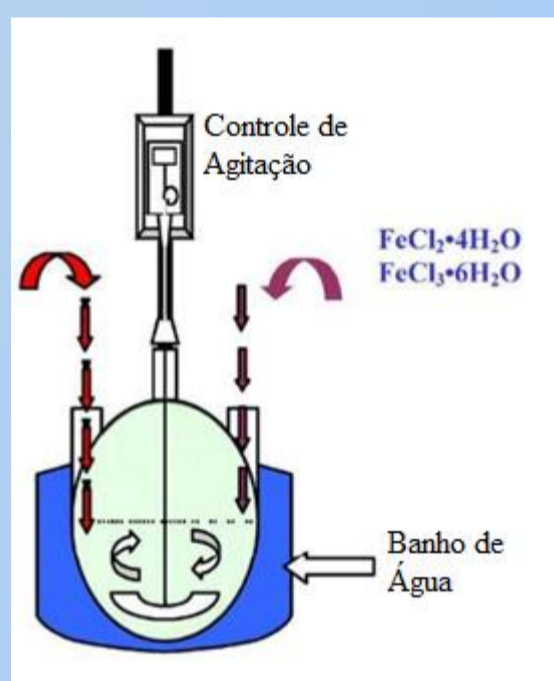


Figura 1. Esquema de síntese das nanopartículas de óxido de ferro.

RESULTADOS

Os diferentes produtos de síntese foram analisadas por técnicas como microscopia eletrônica de varredura (MEV), espectroscopia de infravermelho, difração de raios-X. Veja-se Figuras 2,3 e Tabela 1.

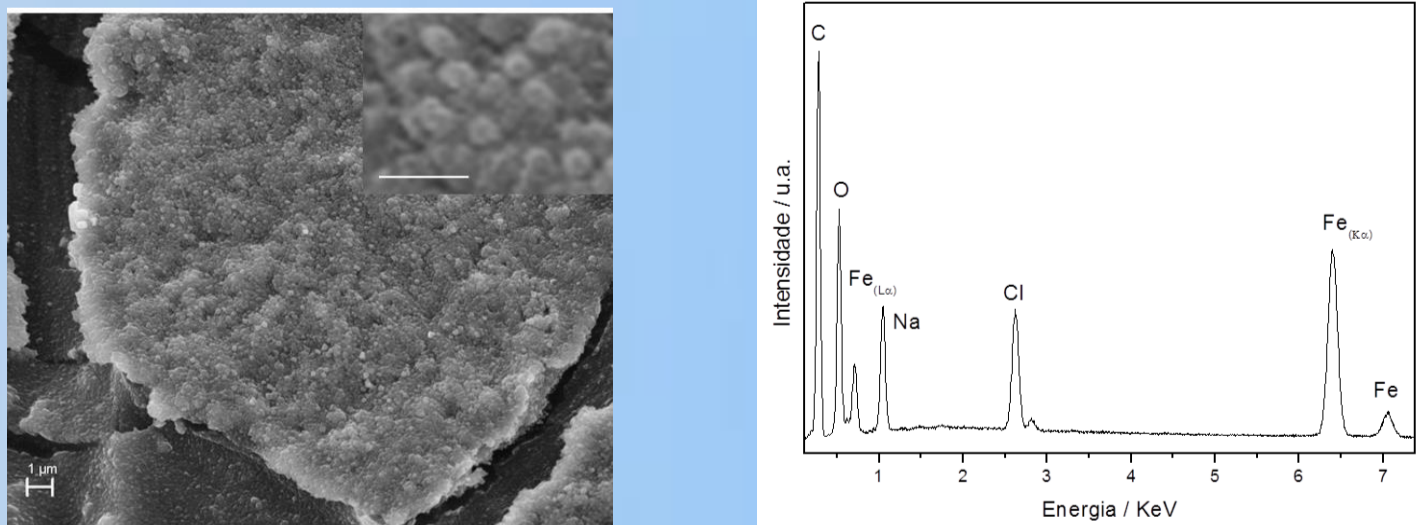


Figura 2. Imagem de microscopia eletrônica das nanopartículas de óxido de ferro (esq.). Espectro de raios-X por dispersão em energia mostra a composição das partículas (dir.). A imagem inserta mostra as partículas de diâmetro de 60 nm. A barra branca é igual a 150 nm.

Em todas as amostras se observam os planos de difração (111), (220), (311), (400), (422), (440), e (511), que correspondem à fase magnetita.

Foi possível calcular a composição das diferentes fases a partir do espectro. Veja-se Tabela 1. Como valor teórico se tomarem os dados calculados a partir dos padrões de difração de raios-X das mesmas amostras.

AGRADECIMENTOS

Os Autores agradecem a CNPq. V.L. agradece as facilidades de CNANO/UFRGS.

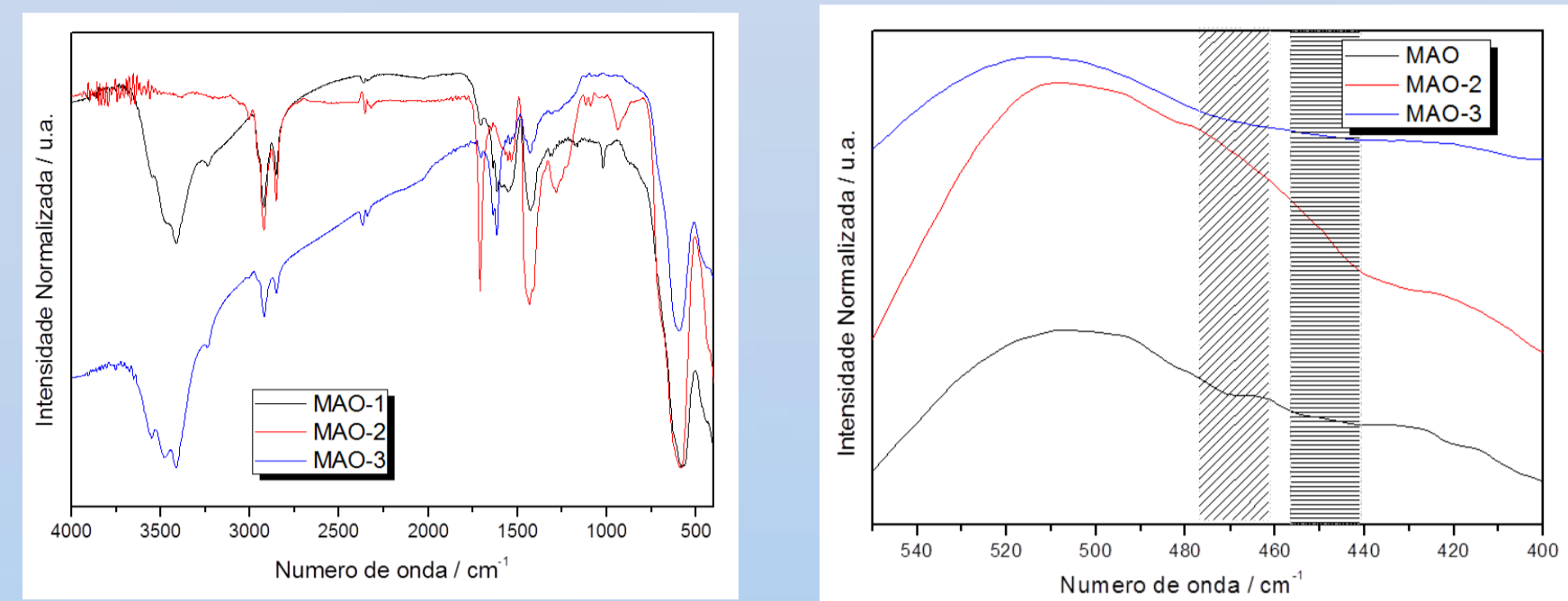
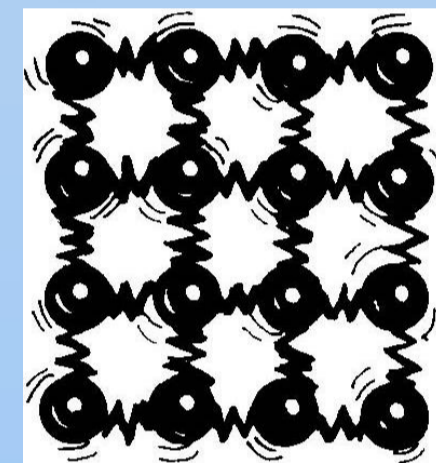


Figura 3. Espectro de infravermelho das amostras de nanopartículas de óxido de ferro (esq.). Espectro infravermelho no intervalo 600-400 cm^{-1} (dir.). A área tracejada mostra a região onde os modos da magnetita são apreciáveis.



$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \left[\frac{f}{(M_x M_y)/(M_x + M_y)} \right]^{1/2}$$

$\bar{\nu}$ = a frequência de vibração (cm^{-1})
 V = velocidade da luz (cm s^{-1})
 f = constante de força de união (dina cm^{-1})

Figura 4. Esquema dos átomos vibrando (esq.), imagem adaptada de referência 3. Formula que relaciona constante de força com frequência de vibração (dir.).

Tabela 1. Resultados obtidos a partir de difração de raios-X e espectroscopia vibracional.

Dados calculados a partir de difração de raios-X (teóricos).	Dados obtidos a partir de espectroscopia infravermelha (experimentais).
MAO-1: 59% magnetita, 13% maghemita, 27% hematita.	MAO-1: 65-76% magnetita/maghemita, 26% hematita.
MAO-2: 72% magnetita, 18% maghemita, 8% hematita.	MAO-2: 82% magnetita, --% maghemita, --% hematita.
MAO-3: 73% magnetita, 21% maghemita, 5% hematita.	MAO-3: 81% magnetita, --% maghemita, 4% hematita.

Resultados preliminares mostram um erro menor do 10%. As constantes de força calculadas nas diferentes fases ficam no intervalo ao $4,9\text{-}5,8 \times 10^{+6}$ dina/cm.

CONCLUSÕES PARCIAIS

O método de co-precipitação produz nanopartículas de óxido de ferro de 60 nm de diâmetro. A indexação dos planos de difração das amostras coincide com a presença da fase magnetita principalmente.

As bandas de infravermelho na região entre $1000\text{-}400 \text{ cm}^{-1}$, mostra a presença de fases de magnetita, hematita e maghemita. Porém não é possível separar os modos vibracionais das fases de magnetita e maghemita.

Através dos espectros, é possível definir que a fase hematita é a que mais pode ser afetada quando interagir com outra fase, podendo se dizer que é a fase mais ativa para aplicações em catálise.

Mediante a espectroscopia vibracional pode-se calcular de maneira mais acessível a composição das nanopartículas de óxido de ferro.

REFERÊNCIAS

- Shengchun Qu; Haibin Y.; Dawei R.; Shihai K.; Guangtian Z.; Dongmei L.; Minghui L., J. of Coll. and Interface Sci. **1999**, 215, 190-192.
- P. Moodley, F.J.E. Scheijen, J.W. Niemantsverdriet, P.C. Thüne, Catalysis Today, 154, **2010**, 142-148.
- <http://www.preparatoriaabierta.com.mx/fisica-2/fisica2-fasc1.php>. [accesado 03-10-2014].
- Fangyuan Zhao, Baolin Zhang, Lingyun Feng, Materials Letters, **2012**, 112-114.