

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2022**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São Carlos: IFSC, 2022.

446 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

IC68

Incorporação do Gálio em vidros bioativos: novas relações estruturais/funções descobertas por técnicas de RMN de estado sólido

GOMES, Yara Hellen Firmo; ECKERT, Hellmut

yaragomes@usp.br

Desde a publicação pioneira reportando a habilidade de certos vidros no diagrama de composição $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Na}_2\text{O} - \text{P}_2\text{O}_5$ para juntar material ósseo sem formar tecido fibroso ao redor deles ou promover inflamação ou toxicidade (1), pesquisa e desenvolvimento de vitrocerâmicas e vidros bioativos promoveram melhora da qualidade de vida. Dependendo da aplicação pretendida, aditivos podem ser adicionados para melhor performance. O gálio, particularmente, é um elemento semi-metálico que vem sendo usado na detecção de imagens e tratamento terapêutico de diversos distúrbios, como reabsorção óssea acelerada, doenças infecciosas/autoimunes e câncer. (2) Até o momento, entretanto, não há conhecimento sobre a relação entre os detalhes de sua incorporação estrutural as e propriedades bioativas. Para explorar esse assunto, a espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) oferece uma abordagem inherentemente quantitativa e experimentalmente flexível, podendo dar respostas específicas sobre o grau de polimerização da rede estrutural do vidro, a distribuição espacial das espécies e as funções estruturais dos elementos introduzidos nessas redes. O presente trabalho propõe-se a estudar vidros bioativos dopados com gálio, derivados de fusão e derivados do processo *sol-gel*, utilizando RMN como ferramenta principal e técnicas de caracterização adicionais. Para os vidros derivados de fusão, foram produzidas 7 amostras de Biosilicato® dopadas com gálio, de composição $[(49, 16 - x)\text{SiO}_2 - (23, 33)\text{Na}_2\text{O} - (25, 79)\text{CaO} - (1, 72)\text{P}_2\text{O}_5 - (x)\text{Ga}_2\text{O}_3]$, onde $x = 0, 1, 2, 4, 6, 8, 10$ mol%. Estas amostras foram submetidas a medidas de DSC e estudos de RMN para os núcleos de ^{29}Si , ^{31}P , ^{23}Na e ^{71}Ga . Os resultados das medidas de DSC apresentam um aumento da temperatura de transição vítreia com o aumento do teor de Ga da amostra, indicativo da diminuição do número de átomos O não-ligantes. Já os espectros RMN indicam que o gálio encontra-se na coordenação 4 e que há formação de ligações Ga-O-Si com o aumento do teor do gálio na amostra, assim como um efeito de proximidade e interação dos átomos de P e Ga. Nessas medidas, não se nota diferenciação entre as espécies de Na compensando a mudança de O não-ligantes na amostra de 0%Ga e neutralizando as espécies de $\text{GaO}_{4/2}$ nas demais, resultado inesperado e que será explorado posteriormente. Para as amostras de *sol-gel*, foram preparadas amostras de composição $[(80 - x)\text{SiO}_2 - (15)\text{CaO} - (5)\text{P}_2\text{O}_5 - (x)\text{Ga}_2\text{O}_3]$ e $x = 0$ (mol%), modificando a quantidade de surfactante adicionado para otimizar a síntese. Medidas de fisiossorção de N_2 (BET/BJH) sugerem que a área de superfície das amostras mesoporosas não variam expressivamente pela razão template/sílica (240-280 m^2/g), mas que a distribuição do tamanho dos poros dos materiais pode ser influenciada por esta razão. A presente fase do estudo foca no desenvolvimento e otimização da síntese e caracterização dos vidros obtidos por *sol-gel* dopados com Ga, assim como na inserção do sódio na composição proposta. As novas amostras serão caracterizadas e a bioatividade (cinética de dissolução em fluidos corporais simulados, SBF) será testada, a fim de comparar as propriedades dos sets de amostras.

Palavras-chave: Vidros bioativos. Gálio. Ressonância magnética nuclear.

Agência de fomento: FAPESP (2021/08871-7)

Referências:

- 1 HENCH, L. L.; POLAK, J. M. Third-generation biomedical materials. **Science**, v. 295, n. 5557, p. 1014-7, 2002. DOI: 10.1126/science.1067404.
- 2 KURTULDU, F.; MUTLU, M.; BOCCACCINI, A. R.; GALUSEK, D. Gallium containing bioactive materials: A review of anticancer, antibacterial, and osteogenic properties, **Bioactive Materials**, v. 17, p. 125-146, 2022. DOI: 10.1016/j.bioactmat.2021.12.034.