XXXII Encontro Anual de Iniciação Científica
IX Encontro Anual de Iniciação Científica Jr.
EAIC 2023

CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E MICROESTRUTURAL DE BIOMATERIAIS À BASE DE FOSFATO DE CÁLCIO UILIZANDO O MÉTODO DE RIETVELD

Jean Willian Santos Rodrigues (PIBIC/CNPq/FA/UEPG), Eduarda Rosa Gomes, Sandra Regina Masetto Antunes, Eder Carlos Ferreira de Souza, Christiane Philippini Ferreira Borges, Suellen Aparecida Alves, André Vitor Chaves de Andrade (Orientador), e-mail: avcandrade@gmail.com.

Universidade Estadual de Ponta Grossa

Ciências Exatas e da Terra – Física – Física da Matéria Condensada - Cristalografia

Palavras-Chave: *Cristalografia Computacional, Biomateriais, Difração de Raios X.*

Resumo

O estudo teve como objetivo o refinamento de estruturas cristalinas pelo Método de Rietveld de biocerâmicas baseadas em fosfato de cálcio utilizando métodos computacionais para verificar a efetividade da substituição do grupo hidroxila da hidroxiapatita (HA) por flúor, por meio de duas rotas químicas diferentes. Foram analisadas três amostras preparadas pelo método hidro/solvotermal: HA sem a adição de flúor, HA obtida por adsorção de flúor e HA obtida por adição de flúor por agitação durante o processo de síntese. Os resultados evidenciam que a substituição foi efetiva somente neste último caso.

Introdução

Os biomateriais à base de sais de fosfato de cálcio são particularmente interessantes devido à sua biocompatibilidade, já que são semelhantes à matriz inorgânica dos tecidos calcificados. Biocerâmicas, como hidroxiapatita e fluorapatita (FAP), desempenham um papel importante na medicina regenerativa devido à sua compatibilidade com o corpo humano (BORKOWSKI, 2020; HENCH, 2013). Uma vez que as propriedades macroscópicas desses materiais são determinadas por seus arranjos estruturais, é fundamental que se realizem estudos desse tipo. A difração de raios X e o Método de Rietveld (RIETVELD, 1969) são ferramentas poderosas para este entendimento, uma vez que possibilita uma variedade de análises estruturais e microestruturais.

Materiais e Métodos

Amostras de hidroxiapatita/fluorapatita foram disponibilizadas pelo Grupo de Pesquisa em Materiais Funcionais e Estruturais. Foram preparadas três amostras pelo método hidro/solvotermal: HA sem a adição de flúor, e HA com flúor adicionado por agitação e adicionado por adsorção. Os dados de difração de raios X foram obtidos por meio de varredura rápida, na razão de 1º/min, no alcance de 3º a 100º. As análises de Rietveld foram realizadas pelo programa GSAS-II, utilizando modelos estruturais da HA e FAP obtidos na base de dados aberta Crystallography Open DataBase (COD).

Resultados e Discussão

Após utilizar as estratégias do refinamento das amostras, utilizando o software GSAS-II, observou-se que somente a amostra com flúor adicionado por agitação foi caracterizada como fluorapatita, evidenciada por meio de análises de densidades eletrônicas e evolução dos parâmetros de cela, cujos valores são ligeiramente menores para a fluorapatita. Além disso, o padrão de difração da fluorapatita possui picos mais estreitos, o que sugere cristalitos maiores que as duas amostras caracterizadas como hidroxiapatitas.

Conclusões

As análises estruturais e microestruturais obtidas pelo Método de Rietveld foram fundamentais para a confirmação das fases cristalinas identificadas, pois o padrão de difração da hidroxiapatita é semelhante ao da fluorapatita. A análise estrutural por meio das densidades eletrônicas tornou evidente que apenas um dos métodos de síntese resultou na estrutura da fluorapatita. Além disso, apresentou os seus parâmetros de cela ligeiramente menores.

Agradecimentos

Os autores agradecem à UEPG, ao C-LABMU pela disponibilização das amostras e à Fundação Araucária pela concessão da bolsa de Iniciação Científica.

BORKOWSKI, Leszek *et al.* Fluorapatite ceramics for bone tissue regeneration: Synthesis, characterization, and assessment of biomedical potential. **Materials Science and Engineering: C**, v. 116, p. 111211, 2020.

HENCH, Larry L. **An Introduction to Bioceramics**. 2. ed. London: Imperial College Press, 2013.

RIETVELD, H. M. A profile refinement method for nuclear and magnetic structures. **Journal of Applied Crystallography**, v. 2, n. 2, p. 65–71, 1969.