



ZIRCONIUM INCORPORATION IN AMINO-FUNCTIONALIZED MESOPOROUS SILICA (NH₂-MCM-41) VIA ONE-POT SYNTHESIS FOR ANTIMICROBIAL APPLICATIONS

¹Carlos F. O. Santos (PG)*, ²Mayanne V. de Oliveira (IC), ³Fabio Alexandre de Oliveira Scacchetti (PQ)
¹André Luiz Tessaro (PQ), ¹Rafael Block Samulewski (PQ)

tufyfelipe@gmail.com*; mayanne.2022@alunos.utfpr.edu.br; fabioscacchetti@utfpr.edu.br,
andretessaro@utfpr.edu.br; samulewski@utfpr.edu.br.

¹Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, UTFPR – AP; ²Curso superior de Engenharia Química, UTFPR – AP; ³Programa de Pós-Graduação Têxtil Moda, PPGTM - AP.

Palavras-chave: sílica mesoporosa MCM-41; zircônio; nanomateriais antimicrobianos.

HIGHLIGHTS

- NH₂-MCM-41 was synthesized via a one-pot route using APTES as amino-functionalizing agent.
- Zirconium ions were effectively incorporated at 60 °C from ZrOCl₂·8H₂O solution.
- Adsorption followed a pseudo-second-order kinetic model (R² = 0.9826).
- Maximum adsorption capacity reached 82.56 mg g⁻¹ in about 60 minutes.
- XRF confirmed Zr incorporation (2.22 %) and residual chloride (5.98 %).

RESUMO

A funcionalização de sílicas mesoporosas com metais de transição constitui uma estratégia promissora para o desenvolvimento de materiais avançados com potencial antimicrobiano e aplicações em catálise heterogênea. Neste trabalho, sintetizou-se a sílica mesoporosa aminofuncionalizada NH₂-MCM-41 por rota *one-pot*, utilizando APTES como agente funcionalizante, com o objetivo de promover a coordenação de íons zircônio (Zr⁴⁺) e a posterior formação de sítios nanométricos de ZrO₂ após tratamento térmico. Ensaios de adsorção foram conduzidos com solução aquosa de ZrOCl₂·8H₂O (0,5 mM; 50 mL) em presença de 100 mg de sílica, monitorando-se a concentração de Zr por método colorimétrico baseado na complexação com alizarina sódica. A temperatura de 60 °C favoreceu a incorporação efetiva do metal, enquanto menores temperaturas não apresentaram variações significativas. A modelagem cinética por regressão não linear demonstrou melhor ajuste ao modelo de pseudo-segunda ordem (R² = 0,9826), com constante de velocidade $k = 5,41 \times 10^{-1} \text{ g} \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$ e capacidade máxima de adsorção de 82,56 mg·g⁻¹, atingida em cerca de 60 minutos de reação. A análise por fluorescência de raios X confirmou a presença de Zr (2,22%) e traços de cloro (5,98%), sugerindo contrabalanço de carga após a coordenação. A diferença entre os valores experimentais e teóricos pode estar relacionada tanto à limitação do FRX na detecção de elementos leves (C, N, O) quanto à localização do metal no interior dos mesoporos, menos acessível à excitação superficial. Os resultados obtidos confirmam a viabilidade da incorporação de Zr em sílica mesoporosa funcionalizada, estabelecendo uma base sólida para estudos subsequentes de calcinação, formação de fases de ZrO₂ e avaliação da atividade antimicrobiana. Essa abordagem reforça o potencial da NH₂-MCM-41 como suporte versátil para o desenvolvimento de híbridos metal-sílica voltados a aplicações ambientais e biotecnológica.

AGRADECIMENTOS

Laboratório Multiusuário de Apucarana (LAMAP), CAPES, FUNDAÇÃO ARAUCÁRIA, UTFPR e CNPq processo 420280-2023-5.