

Projeto: Smallmatek

Intercalação de princípios ativos em LDH – desenvolvimento de um modelo teórico para a sua implementação no processo produtivo

Sumário

Os hidróxidos duplos lamelares (layered double hydroxides, LDH) são um tipo de argilas sintéticas com a capacidade de permuta aniônica que lhes conferem uma versatilidade que permite a sua aplicação em diversas áreas. Uma das mais-valias desta funcionalidade é a possibilidade de intercalar ingredientes ativos na sua forma aniônica, possibilitando a sua libertação controlada através de estímulos específicos.

A intercalação é um processo complexo e difícil de concretizar, sendo o seu sucesso altamente dependente das propriedades físico-químicas das moléculas a intercalar e das condições experimentais utilizadas. Para aumentar o sucesso da intercalação e diminuir os insucessos, o estudo deste processo ao nível estrutural e atómico é necessário. Para uma melhor compreensão do processo e permitir a sua implementação no suporte ao processo produtivo, pretende-se desenvolver um modelo teórico, recorrendo a metodologias de Dinâmica Molecular (MD), Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e/ou *Machine Learning* (ML) que nos permita antecipar a possibilidade de sucesso e definir as melhores condições experimentais para essa finalidade.

Palavras-chave: nano-argilas, hidróxidos duplos lamelares, intercalação, modelação molecular, dinâmica molecular e DFT