

Um estudo por XPS da funcionalização de nanotubos de carbono

Adelina P. Santos, Clascídia A. Furtado, Daniel Andrada, Henriete S. Vieira, Maximiliano D. Martins, Renato de Mendonça, Waldemar A. A. Macedo

Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear - CDTN, Belo Horizonte, MG - Brasil

Os nanotubos de carbono (NCs) são considerados os mais notáveis exemplos de nanomaterial por apresentarem propriedades eletrônicas, térmicas, estruturais, mecânicas e químicas excepcionais. Os maiores desafios no estudo e exploração de tais propriedades estão em manipular e isolar estas moléculas. Em geral, os métodos de síntese de NCs geram amostras complexas, com diferentes teores de impurezas (carbono amorfo, suporte cerâmico, carbetos e nanopartículas metálicas) e amplas distribuições de diâmetro e quiralidade. Uma estratégia importante que pode levar à obtenção de amostras puras separadas por tipos e com especificidade química é a funcionalização covalente de NCs. Como os sítios quimicamente reativos nestas moléculas são poucos e os derivados obtidos são na maioria das vezes insolúveis, a caracterização da ocorrência de reações químicas, bem como dos produtos obtidos é uma tarefa árdua. Neste trabalho, apresentamos uma caracterização sistemática de NCs funcionalizados com grupos contendo oxigênio por espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (*XPS*, *X-Ray Photoelectron Spectroscopy*) auxiliados por resultados de espectroscopia no infravermelho (*FTIR*, *Fourier Transform Infrared Spectroscopy*). As amostras de NCs de paredes simples (*SWNT*, *single-wall nanotube*) sintetizadas pelo método de arco elétrico foram submetidas a processos oxidativos térmico (aquecimento a 350°C em atmosfera de ar seco) e químico (digestão em H_2O_2 , HNO_3 e H_2SO_4). Sob essas condições, grupos contendo oxigênio podem se ligar aos átomos de carbono localizados nas extremidades e/ou em defeitos estruturais ao longo da parede dos tubos, diminuindo o caráter sp^2 e aumentando o caráter sp^3 das ligações C-C nos NCs. Essas variações foram claramente observadas em nossos espectros de *XPS*. O ajuste dos espectros obtidos indica desvios químicos no pico C (1s), atribuídos ao aparecimento de grupos C-O, C=O e -O-C=O, presentes em maior quantidade na amostra oxidada. A área sob os picos está relacionada à quantidade relativa da funcionalidade na amostra. Portanto, pela análise minuciosa dos espectros *XPS*, constatou-se que a principal diferença entre as amostras oxidadas por tratamentos diferentes está na razão carbono sp^2/sp^3 . Estes resultados possibilitam a caracterização de reações químicas na superfície dos NCs.

Agradecimentos: CNPq