# Otimização de um processo escalável de modificação química de nanotubos de carbono através de planejamento fatorial

Ingrid B. Costa<sup>1\*</sup>(IC), Vinícius G. de Castro<sup>1</sup>(PQ), Magnovaldo C. Lopes<sup>1</sup>(PG), Kátia C. S. Figueiredo<sup>1</sup>(PQ), Rodrigo L. Lavall<sup>1</sup>(PQ), Glaura G. Silva<sup>1</sup>(PQ). \*ingridbeatriz.costa@yahoo.com.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos 6627, CEP 31270-901

Palavra chave: Nanotubos de carbono, Funcionalização, Planejamento Fatorial

## Introdução

A incorporação de nanotubos de carbono (CNT) em diversos materiais, como matrizes poliméricas, tem se tornado uma abordagem usual devido às propriedades mecânicas, elétricas e térmicas atrativas dessas nanoestruturas. No entanto, a dispersão efetiva dos CNTs em solventes e soluções de polímeros não é uma tarefa simples, o que limita sua utilização. Diversos estudos mostram que com a adição de grupos funcionais oxigenados nas suas paredes, há um aumento no grau de dispersão dos CNTs nos sistemas de interesse [1]. O procedimento mais utilizado para esse fim envolve um tratamento com misturas de ácidos, sob refluxo ou com a utilização de ultrassom de baixa potência. No entanto, com o tratamento ácido, há alteração da estrutura dos CNTs e redução de seu comprimento. Portanto, é crucial o desenvolvimento metodologias que possibilitem a modificação dos CNTs com um teor de grupos oxigenados adequado à melhor dispersão/interação com a matriz sem acarretar extensiva degradação nos mesmos.

Portanto, o grupo desenvolveu um método otimizado e escalável de tratamento ácido para nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWCNT) que envolve o emprego de ultrassom e controle de parâmetros como agitação, tempo e temperatura de reação.

## Resultados e Discussão

Para a compreensão da real influência de cada parâmetro do método e suas possíveis interações na funcionalização e no comprimento médio dos MWCNT, visando o refinamento do processo e obtenção de um ponto ótimo de operação, foi utilizado um planejamento fatorial 2<sup>3</sup> com triplicata no ponto central, sendo analisados os fatores tempo, temperatura e agitação, num total de 11 experimentos. Os experimentos, foram realizados com uma variação de 5℃ na temperatura, 1h no tempo e 140 rpm na agitação para níveis superiores (+1) e inferiores (-1) em relação ao ponto central (0). valores percentuais do grau de funcionalização (GF) dos MWCNTs foram obtidos por termogravimetria, considerando a perda de massa entre 120 e 400 °C e os valores do comprimento médio, determinados por meio das imagens de Microscopia Eletrônica de Varredura, ambos tratados no software MiniTab.

Após análise dos dados, verificou-se que os fatores temperatura e tempo (na faixa analisada) são determinantes para o processo. Não há influencia de interação entre esses parâmetros, bem como da velocidade de agitação. Pelo tratamento estatístico, determinou-se expressões matemáticas que descrevem as duas variáveis respostas: grau de funcionalização e redução do comprimento dos MWCNTS.

A Figura 1 apresenta a distribuição de comprimento dos MWCNTs para os principais tratamentos. Verifica-se que há uma tendência de redução de tamanho dos tubos à medida que as condições se tornam mais severas. GF da ordem de 5,7 a 9,2% foram obtidos.

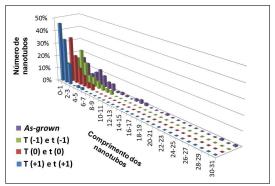


Figura 1. Distribuição de comprimento dos MWCNT

#### Conclusões

Desenvolveu-se um método otimizado de tratamento ácido de nanotubos de carbono que permite o controle de propriedades chave para o material: GF e distribuição de tamanhos. Pelo tratamento estatístico realizado, foi possível modular o processo para obtenção do grau de funcionalização desejado de acordo com a aplicação, bem como fazer o controle da redução de comprimento dos nanotubos de carbono.

### Agradecimentos

#### CNPq, Petrobras

- <sup>1</sup> Osorio, A.G.; Silveira, I.C.L.; Bueno, V.L. e Bergmann, C.P. Applied Surface Science. 2008, 255, 2485-2489.
- <sup>2</sup> Avile's, F.; Cauich-Rodn'guez, J.V.; Moo-Tah, L; May-Pat, A.; e Vargas-Coronado,R.. *Carbon.* 2009, 47, 2970-2975.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Universidade Federal de Minas Gerais