

Estudo de Estruturas Moleculares via Microscopia de Tunelamento

Lucidalva dos Santos Pinheiro^{*1} (PQ) e José Alexander de King Freire¹ (PQ)

1. Laboratório de Microscopia Atômica, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará
e-mail: lspinheiro04@yahoo.com.br

Palavras Chave: adsorção, bipyridina, ouro, tióis, microscopia de tunelamento

Introdução

A adsorção de tióis alquílicos ou aromáticos é um campo de ativa investigação em microscopia de tunelamento no sentido de elucidar suas estruturas e mecanismo de adsorção. Nesse trabalho, estamos estudando a forma de adsorção do ácido 2-mercaptobenzóico (ácido tiosalicílico-TSA) e sua possível interação com moléculas que tenham características de base como a 4,4'-bipiridina (4bipy). A influência de solventes e tempo de incubação sobre a adsorção do TSA serão investigadas preliminarmente, pois os resultados da literatura para o ácido 4-mercaptobenzóico não foram conclusivos.¹

Resultados e Discussão

A amostra de ouro foi recozida termicamente em chama de butano antes da adsorção molecular, para obter uma superfície limpa, ideal para adsorver moléculas. Adsorção de TSA a partir de uma solução 2mM em água-etanol, via self-assembly, produz uma estrutura formada por cadeias na superfície do Au(111). Imagens de resolução molecular como a da figura 1, mostram a estrutura dentro das cadeias. O espaçamento das cadeias é de 14,5 Å e a periodicidade dentro das cadeias é de ~7,5 Å. Esses dados indicam que uma estrutura dimérica pode ocorrer para o TSA. A adsorção pode ser via os dois grupos funcionais, tiól e carboxilato, que estão próximos da superfície.² Imagens da co-adsorção de TSA e 4bipy a partir de uma solução em água-etanol mostram que a estrutura supramolecular não se formou. As moléculas formaram domínios separados. A estrutura formada por 4bipy é uma rede hexagonal com periodicidade de ~5-5,5 Å, indicando uma rede do tipo ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) R30°. Essa estrutura é compatível com a molécula de 4bipy com uma leve inclinação em relação à normal da superfície³.

As moléculas não produzem domínios adjacentes na amostra analisada. Investigação da influência do solvente e do tempo de adsorção utilizados, serão parâmetros a serem determinados para verificar qual sua importância sobre a formação de estruturas supramoleculares.

Os resultados serão ampliados com o estudo da 2,2'-bipiridina interagindo com o TSA, visto que essa molécula possui dois nitrogênios disponíveis para formar ponte de hidrogênio com o grupamento carboxílico de TSA.

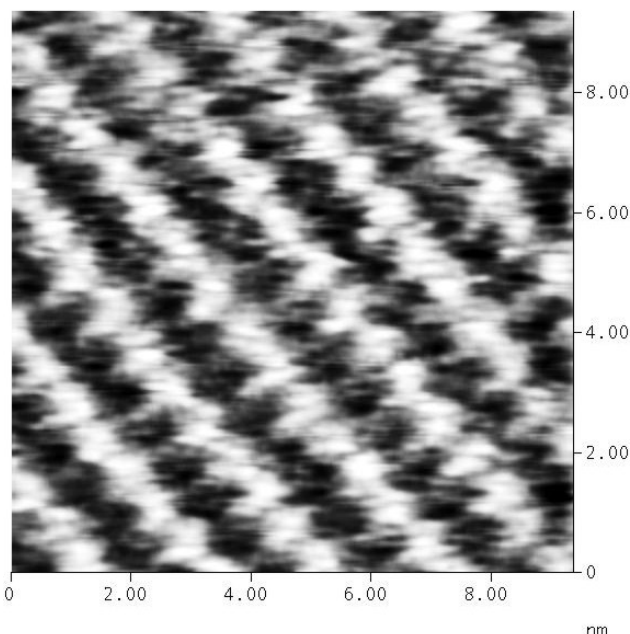


Figura 1. Imagem de microscopia de tunelamento para o TSA adsorvido em Au(111). Área: 9,375 x 9,375 nm².

Conclusões

A molécula de TSA pode adsorver sobre Au(111), porém tempo de adsorção e solvente parecem ser fatores determinantes para a formação da estrutura observada na superfície. Estrutura supramolecular entre TSA e 4bipy não foi detectada nas condições estudadas. A estrutura do Au(111) antes da adsorção também pode ser parte fundamental na formação de estruturas supramoleculares. Amostras muito texturizadas podem inibir a formação de grandes domínios moleculares.

Agradecimentos

A Funcap e ao CNPq pela bolsa de DCR (para LSP) e o auxílio à pesquisa concedidos. Ao LEM do IQ-USP e ao DQOI da UFC por doarem as amostras de ouro e os produtos químicos respectivamente.

¹Schäfer A.H.; Seidel, C.; Chi, L.; Fuchs, H.; Adv. Mat. **1998**, 10, 839.

² Lee, J.R.I.; Willey, T.M.; Nilbson, J.; Terminello, L.J.; De Yoreo, J.J.; van Buuren, T. Langmuir **2006**, 22, 11134.

³Cunha, F.; Tao, N.J.; Wang, X.W.; Jin, Q.; Duong, B.; Dágness, J. Langmuir **1996**, 12, 6410.