

## Estudo da dispersão em solventes orgânicos de nanotubos de carbono de parede única funcionalizados com grupo carboxílico

Sirlaine D. F. Brandão (PG)<sup>1\*</sup>, Daniel A. Maria (PQ)<sup>1</sup>, Cristiano Fantini (PQ)<sup>2</sup>, Adelina P. Santos (PQ)<sup>1</sup> e Clascídia A. Furtado (PQ)<sup>1</sup>. [sirlainequimica@yahoo.com.br](mailto:sirlainequimica@yahoo.com.br), [sdfb@cdtn.br](mailto:sdfb@cdtn.br).

<sup>1</sup> Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear - CDTN/CNEN, Belo Horizonte-MG.

<sup>2</sup> Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, Belo Horizonte-MG..

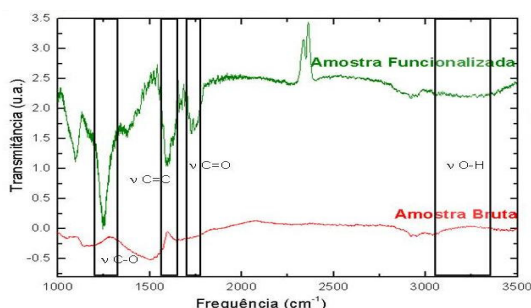
Palavras Chave: nanotubos de carbono, SWNT, funcionalização, grupo carboxílico, dispersão, solventes orgânicos.

### Introdução

Os nanotubos de carbono (NCs) na forma como sintetizados apresentam-se dispostos em feixes, nos quais os tubos são mantidos unidos entre si por fortes interações de van de Waals<sup>1</sup>. Os feixes são praticamente insolúveis, o que impede algumas potenciais aplicações deste material. A exfoliação dos feixes depende tanto das características da superfície dos tubos quanto do ambiente químico no qual eles se encontram. Trabalhos na literatura mostram uma maior solvatação dos NC's em solventes orgânicos após a funcionalização dos mesmos, sendo os solventes do tipo amida os mais efetivos na dispersão<sup>2</sup>. Estudos mais sistemáticos e amplos que levem ao entendimento da dispersão/interação entre NC's e solventes orgânicos são importantes para viabilizar muitas das aplicações. Neste trabalho, estudamos a dispersão de feixes de NC's de parede simples (SWNT's) brutos e funcionalizados com o grupo carboxílico em vários solventes orgânicos (conferir Tabela 1).

### Resultados e Discussão

A funcionalização dos SWNT's envolveu duas etapas: refluxo em HNO<sub>3</sub> e lavagem e dispersão em DMF. O espectro de absorção no infravermelho (Figura 1) para a amostra funcionalizada apresenta absorções relativas à presença do grupo COOH, o que não é observado para a amostra bruta.



**Figura 1.** Espectro FTIR para a amostra bruta e funcionalizada.

Os ensaios de dispersão foram realizados com a concentração inicial de SWNT de 0,02 mg/mL. Os sistemas SWNT/solvente foram tratados sob ultra-32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

som de ponta por 2min, seguido banho ultrasônico por 4hs e novamente ponta 1min e centrifugados a 4000g por 90min. As dispersões foram caracterizadas visualmente e por medidas de absorção óptica na região do UV-Vis. Os resultados são mostrados na Tabela 1. A amostra bruta pôde ser dispersa nos solventes NMP, N12P, DMEU e DMF, enquanto que a amostra funcionalizada apresentou boa dispersabilidade (dispersão estável por meses) apenas no solvente DMA.

**Tabela 1.** Dispersabilidade dos SWNT's brutos e funcionalizados em diferentes solventes orgânicos

| Solventes orgânicos             | Amostra Bruta | Amostra funcionalizada |
|---------------------------------|---------------|------------------------|
| 1-metil-2-pirrolidona (NMP)     | Sim           | Não                    |
| 1-vinil-2-pirrolidona (NVP)     | Não           | Não                    |
| 1-octil-2-pirrolidona (N8P)     | Não           | Não                    |
| 1-dodecil-2-pirrolidona (N12P)  | Sim           | Não                    |
| 1,3-dimetil-imidazolidona(DMEU) | Sim           | Não                    |
| N,N-dimetil-formamida (DMF)     | Sim           | Não                    |
| N,N-dimetilacetamida (DMA)      | Não           | Sim                    |

### Conclusões

A introdução do grupo carboxílico na superfície dos SWNT's muda completamente a sua dispersabilidade, em relação à amostra bruta, em solventes orgânicos do tipo amida. A estabilidade da dispersão SWNT-COOH/DMA é favorecida por efeito de polarizabilidade, reforçado pelo aumento de sítios de defeitos e consequente funcionalização das paredes dos tubos.

### Agradecimentos

Fapemig, CNPq, CNEN.

<sup>1</sup> Dresselhaus, M. S.; Dresselhaus G.; e Jorio, A. (Eds.). Carbon Nanotubes: Advanced topics in the structure, properties and applications, Springer, Berlin, **2008**.

<sup>2</sup> Furtado, C. A. *et al. J. Am. Chem. Soc.*, **2004**, 126, 6095.