

Efeitos de Transferência de Carga em Nanotubos de Carbono Funcionalizados

Marco-Tulio F. Rodrigues^{1*} (PG), Cristiano Fantini² (PQ), Glaura G. Silva¹ (PQ).
*mtuliofr@gmail.com

¹Departamento de Química, UFMG, ²Departamento de Física, UFMG. Av. Antônio Carlos, 6627, Pampulha, Belo Horizonte, CEP.: 31270-901.

Palavras Chave: nanotubos de carbono, raman, funcionalização

Introdução

Os nanotubos de carbono (NTs) possuem propriedades físicas bastante interessantes, como boas condutividades elétrica e térmica e elevada resistência mecânica¹. Além disso, o fato de apresentarem uma das dimensões nanométricas garante uma elevada área superficial, o que amplia o leque de opções para sua aplicabilidade.

Entretanto, um desafio para a aplicação desses materiais é a obtenção de boas dispersões em solventes e de interfaces fortes em compósitos. Para contornar esses problemas, uma alternativa é inserir grupos funcionais na superfície dos NTs, pelo processo de funcionalização química.

Após a funcionalização, esses grupos passam a doar ou retirar carga negativa dos nanotubos, em processos de transferência de carga. Como nos nanotubos há um forte acoplamento entre elétrons e fônons², a alteração da estrutura eletrônica leva a modificações no espectro vibracional, que podem ser observados pela Espectroscopia Raman.

O objetivo do presente trabalho é produzir e caracterizar nanotubos modificados para posterior integração em nanocompósitos e nanodispositivos. Em particular será apresentada a investigação de modificações nos espectros Raman ocasionadas por efeitos de transferência de carga em nanotubos funcionalizados.

Resultados e Discussão

Foram utilizados nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWNT) oriundos da empresa CNT CO com diâmetro médio de 10-40 nm. Os MWNT foram primeiramente oxidados em uma mistura de ácidos sulfúrico e nítrico 3:1, com o auxílio de um banho de ultrassom. A oxidação resulta na inserção de grupos carboxila nas paredes externas dos tubos (MWCOOH). Em seguida, os NTs oxidados reagiram com o 2,4-toluenodiisocianato (TDI) em acetona, o que leva à formação de um grupo amida entre a carboxila dos nanotubos e o grupo -NCO do TDI (MWNCO). Após cada etapa os nanotubos foram lavados exaustivamente e filtrados. Os nanotubos modificados foram caracterizados por

termogravimetria e espectroscopias na região do infravermelho e Raman.

Os espectros Raman das amostras modificadas e do MWNT sem tratamento, são mostrados na Figura 1. Na região espectral mostrada aparecem as bandas D, D' e G, sendo as duas primeiras associadas a defeitos estruturais na amostra. No espectro da amostra MWCOOH, todas as bandas estão deslocadas cerca de 4 cm^{-1} para maiores frequências com relação às bandas do NT sem tratamento, o que indica o efeito retirador de elétrons do grupo carboxila. Já na amostra após a reação com o TDI, as bandas estão deslocadas cerca de 10 cm^{-1} para menores frequências, o que indica forte efeito doador de elétrons. Pode-se observar que esse efeito é tão intenso que desloca as bandas para números de ondas menores que os das bandas do MWNT não tratado.

Como resultado da funcionalização, há um aumento no número de defeitos nos tubos, o que leva ao aumento da intensidade da banda D, como pode ser visto na Figura 1.

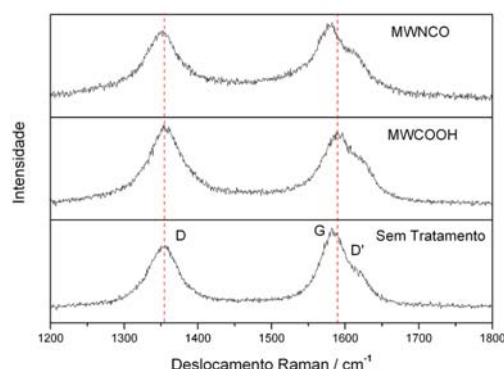


Figura 1. Espectros Raman dos MWNT.

Conclusões

A funcionalização dos nanotubos leva a um deslocamento nas posições espectrais de suas bandas, devido a efeitos de transferência de carga. O deslocamento se dá em direções opostas, dependendo da natureza do grupo funcional.

¹ Coleman, J. N.; Khan, U.; Blau, W. J.; Gun'ko, Y. K. Carbon **2006**, 44, 1624.

² Maciel, I. O.; Anderson, N.; Pimenta, M. A.; Hartschuh, A.; Qian, H.; Terrones, M.; Terrones, H.; Campos-Delgado, J.; Rao, A. M.; Novotny, L.; Jorio, A. Nature Materials **2008**, 7, 878.