

Interação de hidrogênio com grafeno



FEIJÓ, T. O. ¹, SOARES, G. V. ²

¹ Taís Orestes Feijó (taisorestes@hotmail.com), Engenharia Física, UFRGS
² Gabriel Vieira Soares, Departamento de Física, UFRGS

•INTRODUÇÃO:

O grafeno é uma monocamada plana de carbono com ligações do tipo sp^2 e estrutura hexagonal [1] (Fig. 1). Essa configuração permite que ele seja um ótimo condutor elétrico e térmico, extremamente resistente mecanicamente, flexível e transparente à luz visível [2]. E essas propriedades interessantes reunidas num único material, tornou-o objeto de estudo de diversas pesquisas nos últimos anos para possíveis aplicações práticas, como telas flexíveis, processadores mais rápidos, telas LCDs, entre outras.

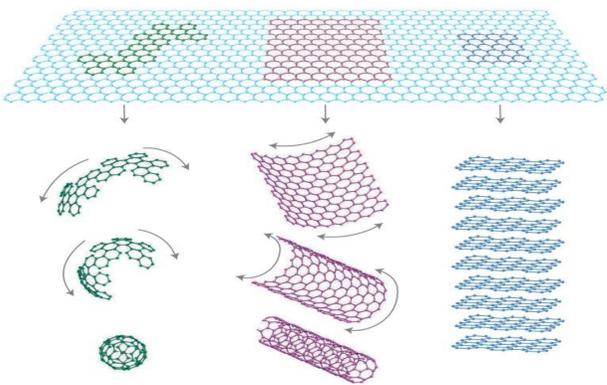


Fig. 1 – Estrutura hexagonal do grafeno, de onde podem ser derivados o (a) fulereno, (b) nanotubo ou (c) grafite [1].

Além disso, alguns estudos mostram que camadas de grafeno podem permitir o armazenamento de hidrogênio para aplicação em células a combustível, o que viabilizaria o uso de combustíveis não poluentes em veículos [3,4]. Dada a importância de compreender a interação do hidrogênio com o grafeno, este trabalho tem por objetivo investigar a incorporação e dessorção do hidrogênio em amostras de grafeno sobre óxido de silício em função do tempo e da temperatura em atmosfera estática.

•METODOLOGIA:

Para investigar a incorporação de H_2 em grafeno, foram usadas amostras de grafeno depositado sobre óxido de silício de 285 nm e amostras com óxido de silício de 285 nm crescido termicamente sobre silício a fim de comparação. As amostras foram tratadas termicamente em atmosfera estática de deutério (é utilizado o deutério, pois é um isótopo raro - abundância natural de 0.15% - na natureza, o que permite diferenciá-lo do hidrogênio presente na atmosfera) durante 60 min em temperaturas variando entre 100°C e 1000°C (Fig. 2(a)). Após, para investigar a dessorção de H_2 do grafeno, foram usadas amostras de grafeno sobre óxido de silício tratadas em atmosfera de D_2 durante 60 min a 650°C, e estas amostras foram então tratadas termicamente em atmosfera de nitrogênio em três temperaturas (150 °C, 300°C e 600°C) e durante três tempos (15 min, 30 min e 60 min) (Fig. 2(b)).

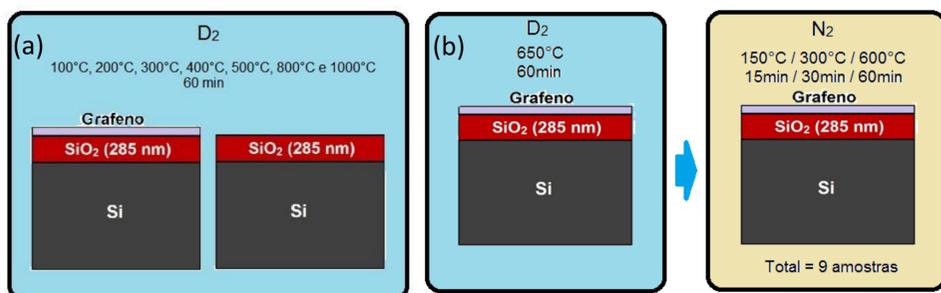


Fig. 2 – Esquema da sequência de tratamentos térmicos realizados nas amostras para investigar (a) a incorporação de H_2 no grafeno e (b) a dessorção do H_2 do grafeno.

•RESULTADOS:

Neste trabalho, foi realizada a técnica de Análise por Reação Nuclear, a fim de determinar a quantidade de deutério presente nas amostras. Na Fig. 3 é apresentada a quantidade de D_2 incorporado nas amostras em função da temperatura de tratamento para amostras com e sem grafeno. Pode-se notar que para as amostras tratadas a 100°C, a quantidade de D_2 está abaixo do limite de detecção. Em 200°C, ocorre a incorporação de D_2 na amostra com grafeno. A partir de 300°C, ocorre uma possível saturação da quantidade de D_2 incorporado no grafeno. E em 1000°C, ocorre uma queda significativa na quantidade de D_2 presente na amostra com grafeno. Nessa temperatura é provável que ocorra a remoção do grafeno da amostra, e por isso a menor quantidade de D_2 .

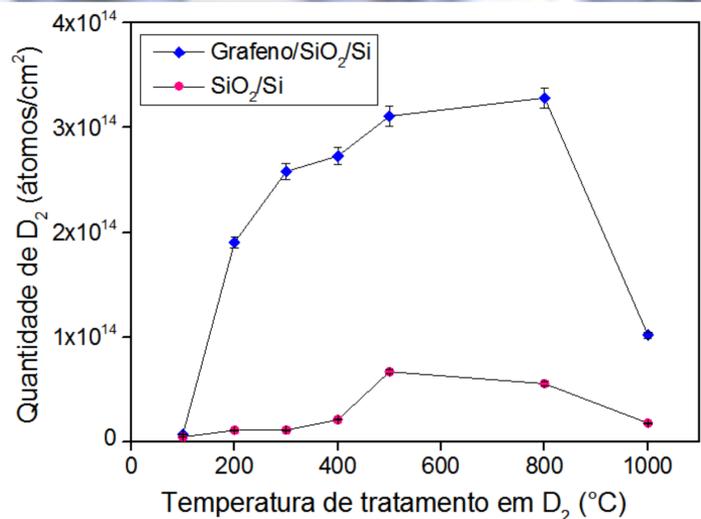


Fig. 3 – Quantidade de D_2 incorporado em função da temperatura para amostras de Grafeno/ SiO_2/Si (em azul) e amostras de SiO_2/Si (em rosa).

Na Fig. 4 é apresentada a quantidade de D_2 presente nas amostras tratadas em D_2 e N_2 em função do tempo de tratamento para as três temperaturas analisadas, onde também foi utilizada uma amostra sem tratamento em N_2 para servir de parâmetro inicial. Pode-se notar que para as amostras tratadas a 150°C, a quantidade de D_2 sofre um decréscimo inicial (após 15 min de tratamento) permanecendo constante para tempos maiores. A 300°C, a quantidade de D_2 remanescente diminui quanto maior o tempo de tratamento. A 600°C, o decréscimo observado é mais acentuado.

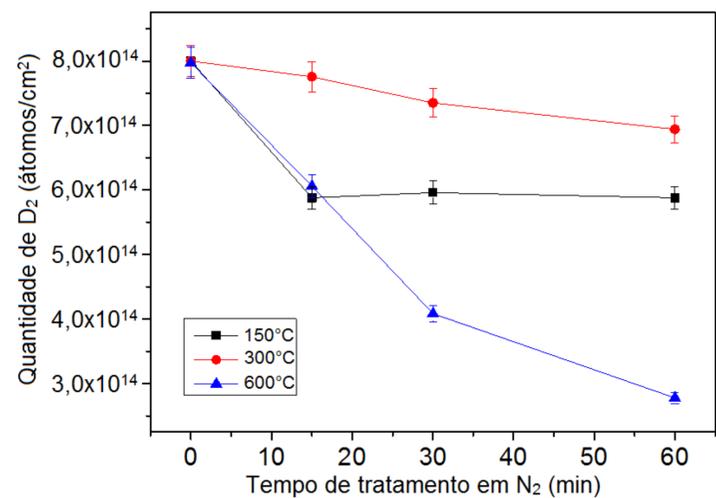


Fig. 4 – Quantidade de D_2 presente nas amostras em função do tempo de tratamento para amostras de Grafeno/ SiO_2/Si tratadas em 150°C (quadrados pretos), 300°C (círculos vermelhos) e 600°C (triângulos azuis).

• CONCLUSÃO:

Com estes resultados, foi possível concluir que a temperatura de tratamento interfere na incorporação do D_2 , onde amostras com grafeno apresentam maior quantidade de deutério do que as amostras sem grafeno, o que indica que o D_2 está se ligando com o grafeno. Também foi possível concluir que, a partir de 300°C, ocorre a saturação dessa incorporação de D_2 no grafeno e em 1000°C, ocorre a remoção do grafeno da amostra, reduzindo a quantidade de D_2 incorporado. Por fim, foi possível concluir que a temperatura e o tempo de tratamento interferem na dessorção do D_2 , sendo maior a dessorção de deutério do grafeno quando ambos parâmetros aumentam (de maneira individual ou conjunta).

• AGRADECIMENTOS:



• REFERÊNCIAS:

- [1] Geim, A. K.; Novoselov, K. S. *The rise of graphene*. Nature Materials 6, 183-191 (2007).
- [2] Novoselov, K. S.; Fal'ko, V. I.; Colombo, L.; Gellert, P. R.; Schwab M. G.; Kim, K. *A roadmap for graphene*. Nature 490, 192-200 (2012).
- [3] Dimitrakakis, G. K.; Tylianakis, E.; Froudakis, G. E. *Pillared graphene: a new 3-D network nanostructure for enhanced hydrogen storage*. Nano Letters 8, 3166-3170 (2008).
- [4] Burrell, J. W.; Gadipelli, S.; Ford, J.; Simmons, J. M.; Zhou, W.; Yildirim, T. *Graphene Oxide Framework Materials: Theoretical Predictions and Experimental Results*. Angewandte Chemie International Edition 49, 8902-8904 (2010).