

Estudo computacional de folhas de óxido de grafeno com variados graus de oxidação

Igor B. Sabadini * (PG)¹, Fernando N. N. Pansini², Jair C. C. Freitas¹.

igor.sabadini@edu.ufes.br

¹Laboratório de Materiais Carbonosos e Cerâmicos – LMC, Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, Av. Fernando Ferrari, 514, CEP 29075-970, Vitória-ES

²Núcleo Capixaba de Computação Científica – NC3, Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, Av. Fernando Ferrari, 514, CEP 29075-970, Vitória-ES

Palavras Chave: materiais grafênicos, óxido de grafeno, simulações computacionais, DFT.

Introdução

O grafeno e o óxido de grafeno (OG) são materiais que têm propriedades eletrônicas importantes para várias aplicações, como, por exemplo, em dispositivos eletroquímicos, óticos e eletrônicos. O estudo computacional desses materiais permite a compreensão de suas propriedades em nível atômico e molecular, contribuindo para a interpretação de resultados experimentais e para a previsão de novas propriedades. A variação do grau de oxidação do OG pode ser observada a partir da análise de espectros de ressonância magnética nuclear (RMN) dos núcleos de ^{13}C . Este trabalho analisa aspectos estruturais de folhas de OG por meio da abordagem *ab initio* e pelo método DFT. Foram especificamente investigadas folhas de OG com diferentes graus de oxidação, com cálculos dos deslocamentos químicos (DQ) associados aos vários sítios e simulações dos espectros de RMN de ^{13}C correspondentes a cada folha.

Resultados e Discussão

Utilizando modelos construídos a partir de um hidrocarboneto policíclico aromático com 150 átomos de carbono e diferentes quantidades de grupos funcionais contendo oxigênio, foram obtidas folhas de OG com variados graus de oxidação. As geometrias dessas folhas foram otimizadas energeticamente, utilizando DFT com funcional B3LYP e base pcJ-0. Foram a seguir calculados os tensores de blindagem e os DQ de ^{13}C para os vários sítios em cada geometria otimizada, permitindo a construção dos espectros simulados de RMN mostrados na Figura 1. Por meio desses resultados, constatou-se que o aumento da oxigenação em folhas de OG gera um aumento dos DQ médios dos núcleos de ^{13}C nos átomos de carbono com hibridização sp^2 (m_{sp^2}). Tal relação é explicada pela presença de correntes de elétrons π circulando nas regiões sp^2 das folhas de OG³.

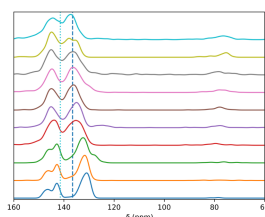


Figura 1. Espectros de RMN de ^{13}C de folhas de OG com diferentes graus de oxidação.

Conclusões

A realização de simulações computacionais para folhas de OG com diferentes graus de oxidação mostrou uma correlação entre os DQ dos núcleos de ^{13}C em átomos de carbono com hibridização sp^2 a quantidade de grupos funcionais contendo oxigênio em cada folha. Os resultados dos cálculos computacionais fornecem uma plataforma importante para a interpretação de resultados experimentais de espectroscopia de RMN de ^{13}C obtidos para materiais grafênicos como OG e OG reduzido.

Agradecimentos

CAPES, FAPES, CNPq, UFES.

¹Justino, D. D. et al. *Journal of Molecular Liquids*, 387, 122612, 2023.

²Silva, T. S. et al., *Journal of Nanoparticle Research*, 27, 121, 2025.

³de Souza, F. A. L., Pansini, F. N. N. et al., *Carbon*, 191, 374, 2022.