

## **CARACTERIZAÇÃO DO ÓXIDO DE GRAFENO POR ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCÊNCIA MOLECULAR**

Gabriele Züge, discente de pós-graduação, Universidade Federal do Pampa,  
Campus Bagé

Carolina Ferreira de Matos Jauris, docente, Universidade Federal do Pampa

e-mail primeiro autor- gabrielezuge.aluno@unipampa.edu.br

A nanotecnologia tem revolucionado as mais diversas áreas, dentre elas, a ambiental, por permitir trabalhar com a matéria em nível atômico e molecular. Com isso, o desenvolvimento de materiais eficientes para aplicações em tratamentos, remediação, sensoriamento e detecção de poluentes tem sido alvo de inúmeros estudos. Dessa forma, os nanomateriais baseados em carbono têm conquistado tamanha notoriedade, em especial, os materiais baseados em grafeno, como o óxido de grafeno (GO). Isso se deve a disponibilidade de locais altamente ativos, grande área superficial e por sua constituição ser definida por uma camada de grafeno funcionalizada com grupos epóxi, hidroxila, carboxílico e carbonila, que o torna ainda mais interessante para aplicações ambientais. O GO consiste em carbonos mistos  $sp^2$  e  $sp^3$ , além disso, os grupos funcionais ricos em oxigênio presentes em sua estrutura abrem o gap óptico, fazendo com que o nanomaterial apresente fluorescência. Portanto, essas fascinantes propriedades do óxido de grafeno, inspira novos estudos e pesquisas, visto que, ainda existem lacunas a serem exploradas, como a compreensão de sua estrutura, tornando-se essencial investigar a respeito de algumas características químicas do GO. Com base nisso, esse estudo tem como objetivo investigar a natureza estrutural e funcional do óxido de grafeno por meio da técnica de espectroscopia de fluorescência molecular. Para isso, inicialmente o GO foi sintetizado e caracterizado por diferentes técnicas. A imagem topográfica de Microscopia de Força Atômica (AFM) evidenciou poucas camadas de grafeno empilhado e tamanho de folha lateral de até  $2 \mu m^2$ . A técnica de Espectroscopia de Infravermelho com Transformada de Fourier (FTIR) foi essencial e comprovou que o grafite foi oxidado, pois houve o aparecimento de bandas características de GO que correspondem aos grupos hidroxila, carbonila, carboxila e epóxi. A concentração de grupos carboxílicos encontrada por titulação potenciométrica foi de  $1,83 \text{ mmol de } -\text{COOH}$  por grama GO. Com a espectroscopia Raman, foi possível observar bandas características de materiais de carbono, uma em  $\sim 1355 \text{ cm}^{-1}$ , denominada banda D, associada a modos vibracionais decorrentes da desordem estrutural devido a defeitos, funcionalizações e carbonos  $sp^3$ , e outra banda em  $\sim 1606 \text{ cm}^{-1}$  chamada de banda G, característica dos modos vibracionais do anel de carbono na folha de grafeno, e também a presença de bandas de segunda ordem, localizadas na região entre  $2700$  e  $3200 \text{ cm}^{-1}$ . Por fim, a espectroscopia UV-Visível destacou os espectros típicos de GO que apresentam duas bandas características, uma em  $300 \text{ nm}$  atribuída à transição  $n \rightarrow \pi^*$  da ligação  $\text{C}=\text{O}$  e outra em  $228 \text{ nm}$  associada à transição  $\pi \rightarrow \pi^*$  de a ligação  $\text{C}-\text{C}$  dos aromáticos. Para a análise de fluorescência, a dispersão de GO ( $1,8 \text{ mg mL}^{-1}$ ) com pH ácido, foi diluída e posteriormente lida em comprimentos de onda de emissão ( $\lambda_{em}$ ) e excitação ( $\lambda_{exc}$ ) que variaram de  $350$  a

520 nm. Como resultado, o óxido de grafeno apresentou fluorescência na região do visível e cabe destacar que, cada banda de fluorescência vem de transições eletrônicas específicas entre os orbitais moleculares antiligantes e ligantes, como  $\sigma^* \rightarrow n$ ,  $\pi^* \rightarrow n$  e  $\pi^* \rightarrow \pi$  que estão associados aos grupamentos contendo oxigênio, que são excitados simultaneamente. Quando esses picos de fluorescência se sobrepõem, um único pico amplo é observado. Neste caso, para o espectro de excitação, ele se alarga com o aumento do  $\lambda_{em}$  e não há pico de absorção acentuado bem definido. Os espectros de emissão de fluorescência apresentaram banda larga em todos comprimentos de onda, com a mais intensa no  $\lambda_{exc} = 450$  nm, análogo a estudos anteriores sobre espectros de fluorescência de GO. Também é observado um leve desvio para a região do vermelho no espectro de emissão, que pode ser explicado em termos de contribuição mais forte (intensidades fracionárias) de componentes de tempo mais longos de emissão para a fluorescência de estado estacionário. Além disso, a emissão desviada para o vermelho possivelmente está associada com a protonação do estado excitado do  $-COO^-$  para  $-COOH$ , vista sob condições ácidas. Sendo assim, a fluorescência do GO na água foi estudada pelo uso de fluorescência molecular, onde obteve-se que a fluorescência é dependente do comprimento de onda de excitação, e isso, caracteriza um comportamento de conjuntos de fluoróforos baseados em carbono de tamanho nanométrico. Por fim, as características espectrais observadas sugerem que grande parte da fluorescência seja predominantemente vindas de grupamentos carboxílicos, mas cabe outras investigações experimentais para elucidar a natureza da fluorescência GO que ainda é algo tão complexo.

**Agradecimentos:** CAPES, UNIPAMPA, CNPq, INCT-Nanocarbono, FAPERGS.

**Palavras-chave:** Espectros; Fluorescência molecular; Transição eletrônica; Caracterização; Nanomateriais de carbono.