

AVALIAÇÃO DE PARÂMETROS DE SÍNTESE DE PONTOS QUÂNTICOS DE CARBONO PRODUZIDOS VIA HIDROTÉRMICA

NICHOLAS FERNANDES DE SOUZA¹; CRISTIANE FERRAZ DE AZEVEDO²;
FRANTCHESCOLE BORGES CARDOSO³; FELIPE RODRIGUES CASSONI⁴;
LEANDRO LEMOS SILVEIRA⁵; FERNANDO MACHADO MACHADO⁶

¹Universidade Federal de Pelotas – nicholasfs97@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – cristiane.quim@gmail.com

³Universidade Federal de Pelotas – frantchescole.cardoso@gmail.com

⁴Universidade Federal de Pelotas – cassoni_felipe@yahoo.com

⁵Universidade Federal de Pelotas – leandrolemos.silveira@gmail.com

⁶Universidade Federal de Pelotas – fernando.machado@ufpel.edu.br

1. INTRODUÇÃO

Com o contínuo aumento da população global, a demanda por energia tem crescido, intensificando as preocupações sobre mudanças climáticas e emissões de gases de efeito estufa (Sinsel; Riemke; Hoffmann, 2020). Nesse contexto, a busca e a utilização de fontes de energias renováveis são cruciais para diminuir as emissões de carbono no setor energético tradicional e contribuir de maneira significativa para mitigar os impactos ambientais adversos (Li et al., 2023).

No campo de materiais avançados, os nanomateriais à base de carbono têm sido essenciais para a construção de dispositivos para a geração de energia limpa, melhorando a eficiência, o armazenamento e a conversão de energia. Suas propriedades físicas e químicas, que variam com o tamanho e a superfície, permitem o controle de sua morfologia e conferem a eles características excepcionais, como excelente desempenho elétrico, óptico e mecânico, fundamentais para sistemas de transferência de carga e novas fontes de energia (Cheng et al., 2022).

Dentre os nanomateriais à base de carbono, os pontos quânticos de carbono (CQDs) se destacam. Esses são nanopartículas de dimensão zero (diâmetro < 10 nm) que se destacam em estudos de fotoluminescência. Compostos por um núcleo de carbono com hibridização sp^2/sp^3 e grupos funcionais contendo oxigênio, eles têm propriedades químicas e físicas únicas, como fotoestabilidade notável e *bandgap* ajustável, o que os torna superiores a materiais fluorescentes convencionais (Maduraiveeran & Jin, 2021). Além disso, apresentam vantagens como baixa toxicidade e excelente biocompatibilidade, podendo também ser sintetizados por diferentes métodos a partir de matérias-primas baratas e abundantes.

A notável capacidade fotoluminescente dos CQDs tem sido crucial para o desenvolvimento de suas novas aplicações, destacando-se como a principal propriedade desse material. Isso possibilita seu uso em diversas áreas, como dispositivos de coleta de luz, fotocatalise, células solares, sensores, bioimagem, fotodetectores e sistemas de armazenamento de energia, entre outros (Tian et al., 2018). Além disso, existem alguns fatores que podem influenciar os efeitos da fotoluminescência, sendo um deles a dopagem com heteroátomos, uma estratégia atrativa e eficiente para aumentar o rendimento quântico dos CQDs (Kou et al., 2020). Os átomos de N e C presentes nos CQDs são comparáveis em tamanho e estrutura, ambos possuindo cinco elétrons de valência, o que lhes permite formar ligações com outros átomos de carbono. Assim, a dopagem com nitrogênio aumenta os defeitos nos estados da superfície dos CQDs, o que aprimora suas

propriedades eletrônicas e a reatividade química da superfície ao introduzir uma variedade de grupos reativos (Kou et al., 2020).

As rotas de síntese dos CQDs são fundamentais para definir suas estruturas e propriedades. A matéria-prima, o solvente e os parâmetros de reação, como tempo, temperatura e pressão, desempenham papéis essenciais e influenciam significativamente nessas características. Algumas rotas são simples e econômicas, como a síntese hidrotérmica, que se destaca por produzir partículas com tamanho uniforme e por ser uma abordagem de uma única etapa, sendo econômica e ecológica (Kumar et al., 2022). Além disso, esta técnica oferece a possibilidade de introduzir facilmente heteroátomos nos CQDs de forma controlada, visando incrementar o rendimento quântico dos mesmos.

Neste sentido, o presente trabalho visa avaliar os parâmetros de síntese de pontos quânticos de carbono sintetizados a partir do ácido cítrico dopado com ureia utilizando a rota hidrotérmica, focando na otimização de suas propriedades fotoluminescentes. Esse controle sobre os parâmetros de reação é extremamente importante, pois eles influenciam significativamente na estrutura do CQDs e causam mudanças nas propriedades finais desses materiais.

2. METODOLOGIA

Os CQDs foram sinterizados utilizando ácido cítrico como fonte de carbono e de ureia como fonte de nitrogênio. Os dois precursores foram dissolvidos em 20 ml de água destilada sob agitação por 10 min. A solução homogeneizada foi transferida para uma autoclave de aço inoxidável de 150 ml revestida de Teflon. Para avaliação dos parâmetros, as sínteses foram realizadas variando a temperatura (140, 160, 180 e 200 °C) e o tempo de reação (1, 2, 4 e 6 horas) sendo todas aquecidas a 1 °C/min. Após o resfriamento à temperatura ambiente, a solução de CQDs obtida foi centrifugada a 3500 rpm por 30 min e purificada utilizando um filtro de seringa de membrana de acetato de celulose de 0,22 µm para remoção das partículas grandes. Os materiais sintetizados tiveram suas propriedades ópticas quantificadas por meio das espectroscopias de absorção UV-Vis e de fluorescência.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para obter CQDs com excepcionais propriedades ópticas, o método de variável controlada foi utilizado para avaliar os efeitos do tempo e a temperatura de síntese na fotoluminescência. A Figura 1A indica que CQDs sintetizados por 2 horas mostram a maior intensidade de fotoluminescência quando excitados pelo comprimento de onda de 350 nm. Comparando as curvas da Figura 1B, pode-se observar que a intensidade da fotoluminescência aumenta de 140 °C para 160 °C e 180 °C, onde está última apresentou maior intensidade. No entanto, a curva de 200 °C (linha azul) mostra uma redução nesse valor, possivelmente devido a efeitos como aglomeração ou degradação da estrutura.

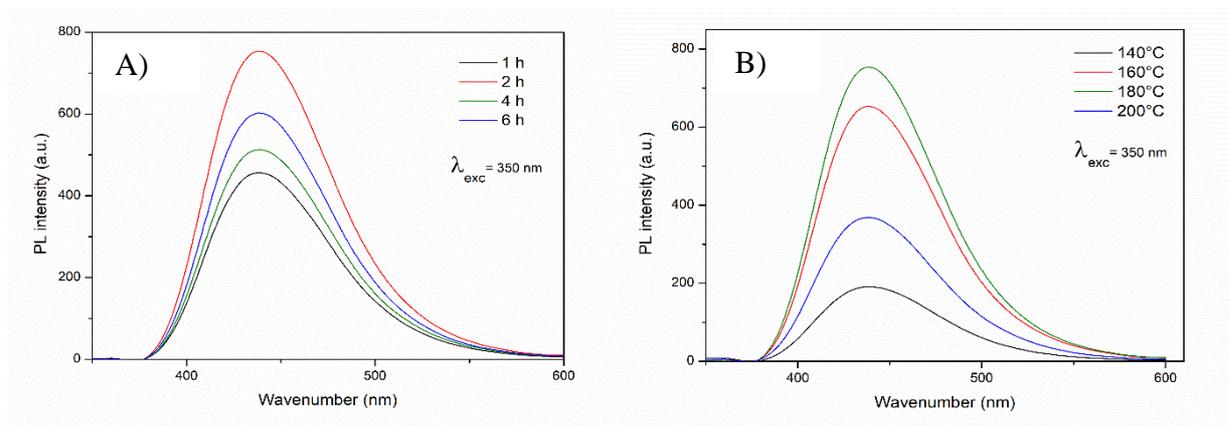


Figura 1: (A) Influência do tempo de síntese dos CQDs; (B) Influência da temperatura de síntese.

A Figura 2 mostra o espectro UV-Vis de CQDs sintetizados a 180 °C por 2 horas, com picos de absorção em 234 nm e 344 nm. O pico de 234 nm é atribuído à transição π - π^* das ligações C=C, enquanto o pico de 344 nm corresponde à transição n- π^* dos grupos C=O e C-N, frequentemente associada à forte emissão de fluorescência.

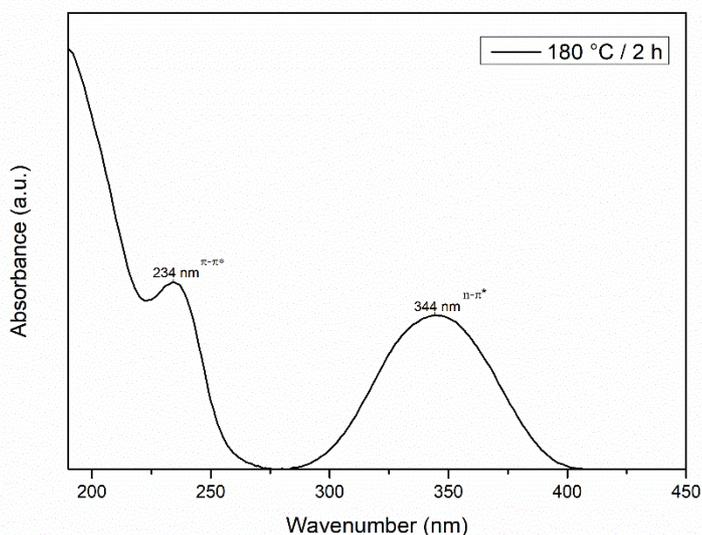


Figura 2: Espectro UV-Vis de CQDs. Condições: (180°C em 2 horas)

4. CONCLUSÕES

Com base nos resultados, pode-se concluir que a otimização das propriedades ópticas dos CQDs foi alcançada por meio de um controle cuidadoso das variáveis de síntese, como o tempo e a temperatura. A síntese por 2 horas mostrou a maior intensidade de fotoluminescência com excitação a 350 nm, indicando que esse tempo é ideal para maximizar a emissão de luz. Em relação à temperatura, a amostra sintetizada a 180 °C apresentou uma intensidade de

fotoluminescência significativamente superior às demais, sugerindo que essa é a temperatura ideal para alcançar as melhores propriedades ópticas dos CQDs. No entanto, a redução na intensidade observada a 200 °C sugere que temperaturas mais altas podem causar aglomeração ou degradação da estrutura dos CQDs, comprometendo sua eficiência. Assim, para produzir CQDs com propriedades ópticas otimizadas, recomenda-se uma síntese a 180 °C por 2 horas.

Além disso, a espectroscopia de absorção UV-Vis confirmou que a dopagem com ureia foi eficaz, pois o material apresentou o pico característico desse processo. A introdução de átomos de nitrogênio também melhorou o desempenho da fluorescência, tornando-o adequado para uma gama de aplicações potenciais.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

SINSEL, S.; RIEMKE, R.; HOFFMANN, V. Challenges and solution technologies for the integration of variable renewable energy sourcesda review. **Renewable Energy**, 56, v. 145, p. 2271-2285, 2020.

LI, C. et al. Green production and green technology for sustainability: The mediating role of waste reduction and energy use. **Heliyon**, v. 9, p. e22496, 2023.

CHENG, K. et al. Advanced triboelectric nanogenerators based on low-dimension carbon materials. **A review. Carbon**, v. 194, p. 81-103, 2022.

MADURAVEERAN, G., & JIN, W. (2021). Carbon nanomaterials: Synthesis, properties and applications in electrochemical sensors and energy conversion systems. **Materials Science and Engineering: B**, v. 272, p. 115341, 2021.

TIAN, P. et al. Graphene quantum dots from chemistry to applications. **Materials Today Chemistry**, v. 10, p. 221-258, 2018.

KOU, X. et al. A review: recent advances in preparations and applications of heteroatom-doped carbon quantum dots. **Dalton Transactions**, v. 49, n. 21, p. 6915–6938, 2020.

KUMAR, P. et al. A review on advancements in carbon quantum dots and their application in photovoltaics. **RSC Adv.**, v. 12, p. 4714, 2022.