



Funcionalização do grafeno com a molécula sal de diazônio e suas aplicações em matrizes poliméricas

Dandara Martiniano Sousa do Nascimento¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O grafeno é um alótropo de carbono sintetizado artificialmente, que chama atenção por ser um material que consiste em uma monocamada formada por células hexagonais de carbono, ter uma espessura atômica e por suas propriedades como, alta condutividade térmica, alta resistência térmica e eletrônica, boa transparência, um material fino e ser bem flexível. O resultado da funcionalização do grafeno com o sal de diazônio é que se dispersam facilmente em solventes apróticos polares, permitindo alternativas para uma incorporação simples em diferentes matrizes poliméricas. Foi construído uma folha de grafeno e uma molécula do sal de diazônio na plataforma Material Studio, e ligamos um ao outro. Fizemos cálculos da estrutura eletrônica do grafeno funcionalizado com a molécula do sal de diazônio utilizando as ferramentas CASTEP e DMol3. Obtemos uma largura de banda do HOMO e LUMO da molécula de diazônio de 0.086 eV mas quando se liga ao grafeno esse valor é de 0.391 eV. Observamos que o estado s do grafeno não tem contribuição na energia de Fermi, no entanto quando se funcionaliza com o sal de diazônio eles contribuem. Concluímos que o grafeno funcionalizado com o sal de diazônio tem características de um metal.

Palavras-chave: Grafeno, sal de diazônio, matrizes poliméricas.

¹ Aluna do ECI Orlando Venâncio dos Santos, Cuité, PB, e-mail: danda.dent27@gmail.com

² Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



***Functionalization of graphene with the diazonium salt molecule and its
applications in polymeric matrices***

ABSTRACT

Graphene is an artificially synthesized allotrope of carbon, which draws attention because it is a material that consists of a monolayer formed by hexagonal carbon cells, has an atomic thickness and for its properties such as high thermal conductivity, high thermal and electronic resistance, good transparency, a thin material and being very flexible. The result of functionalizing graphene with diazonium salt is that it easily disperses in polar aprotic solvents, allowing alternatives for simple incorporation into different polymer matrices. A graphene sheet and a diazonium salt molecule were built on the Material Studio platform, and we connected them to each other. We carried out calculations of the electronic structure of graphene functionalized with the diazonium salt molecule using the CASTEP and DMol3 tools. We obtain a HOMO and LUMO bandwidth of the diazonium molecule of 0.086 eV but when it binds to graphene this value is 0.391 eV. We observed that the s-state of graphene does not contribute to the Fermi energy, however when it is functionalized with the diazonium salt they contribute. We conclude that graphene functionalized with diazonium salt has characteristics of a metal.

Keywords: Graphene, diazonium salt, polymer matrices.