

Síntesis de nanotubos coaxiales de MoS₂ y Carbono

Reza, Carmen; Pérez, Mario; Santiago, Patricia



MX0300172

Introducción

Desde principios de la década de 1990, cuando Iijima¹ pone su atención en el estudio de los nanotubos de carbono de paredes múltiples y de una sola pared² (MWNTs y SWNTs por sus siglas en Inglés), se ha despertado en la comunidad científica el interés por estudiar estas formas alotrópicas del carbono debido a sus múltiples aplicaciones dentro de diversos campos, como son el de los materiales compuestos de alta resistencia, los componentes electrónicos e incluso en el almacenamiento de una gran variedad de gases, dentro de los cuales el hidrógeno es de particular interés debido a sus posibles aplicaciones en el campo de la producción de energía³.

Hoy día sabemos que estos tubos son formas alotrópicas del carbono y que además estas estructuras tubulares no son exclusivas del carbono sino de todos los compuestos tipo capa como los dicalcogenuros (WS₂ y MoS₂ entre otros).

Combinando las propiedades de ambas estructuras tubulares nuestro grupo sintetizó estructuras coaxiales de MoS₂ con C con el fin de estudiar los posibles cambios estructurales de los nanotubos de MoS₂ al ser sometidos a un flujo de gas propileno como precursor de Carbono en un tratamiento térmico. Se realizaron estudios de caracterización estructural por microscopía electrónica de transmisión. La simulación teórica de la estructura se realizó utilizando un algoritmo tipo multicapa.

Metodología

Se sintetizaron nanotubos de MoS₂ usando una placa nanoporosa de Al₂O₃ crecida por electrólisis. Para la síntesis de los nanotubos de MoS₂ se utilizó una solución precursora de tetratiomolibdato de amonio en DMF. Un templete de 1cm² fue sumergido en la solución precursora, evaporando el solvente a través de un plato caliente a 70°C. El templete resultante fue puesto dentro de un horno tubular con un flujo de H₂/N₂ al 10% a una velocidad de 20ml/min a 450°C. El horno fue mantenido a esta temperatura durante una hora, en este paso se obtuvieron los nanotubos de MoS₂, posteriormente se dejó pasar un flujo de propileno a una razón de 20ml/min elevando la temperatura del horno a 800°C durante una hora para inducir la formación de nanotubos y de estructuras alotrópicas de carbono.

Resultados

Para determinar el tipo de cambio estructural inducido en los nanotubos de MoS₂ debido al flujo de gas propileno, se utilizó la microscopía electrónica de transmisión. Se obtuvieron imágenes de alta resolución en un microscopio Jeol 2010 EX equipado con un espectrómetro EDS para análisis químico elemental. El templete de Al₂O₃ con los nanotubos fue preparado para este tipo de análisis y colocado en una rejilla con soporte de carbono amorfo. La figura 1 muestra una de las típicas estructuras tubulares que se obtuvieron. Se realizó además un análisis químico elemental en una zona de 5 nm de diámetro sobre diferentes tubos encontrándose que la composición química era fundamentalmente de C, S, y Mo. Se obtuvieron también patrones de nanodifracción de los tubos en cuestión,

1 Iijima, S. 1991, *Nature (London)*, 354, 56-58

2 Iijima, S. 1993, *Nature (London)*, 363, 603-605

3 Darkrim, 2001, *F.L. Int. J. Hydrogen Energy*, 27, 193-202

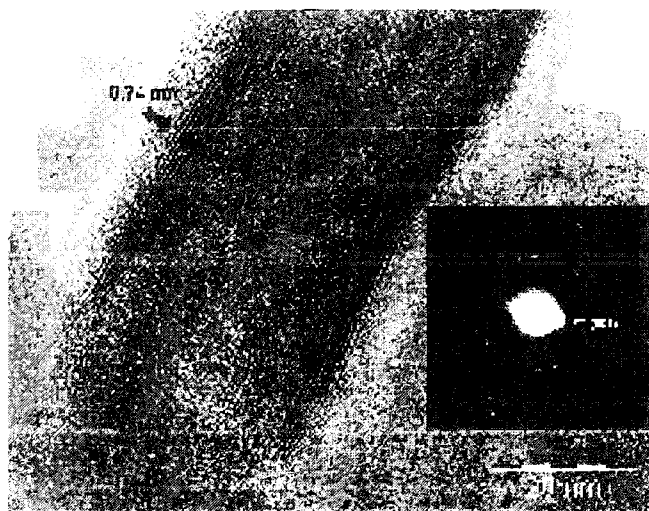


Fig. 1 Imagen de alta resolución de un nanotubo coaxial y su correspondiente patrón de difracción.

encontrándose los lóbulos característicos en la reflexión (0002) correspondientes a una estructura tubular.

Posterior a la obtención de los datos experimentales se realizó una simulación teórica de un sistema coaxial en donde los tubos de carbono se colocaron de la forma en que abrieran la estructura de los nanotubos de MoS_2 que les sirvieron como molde, en la cual se calculó la energía potencial de forma empírica mediante un análisis teórico en los procesos de formación, simulando las imágenes obtenidas a partir del microscopio de transmisión utilizando el programa de SIMULATEM a través de un algoritmo tipo multicapa.

Análisis de resultados

La figura 1 muestra una estructura tubular con el contraste típico de capas del MoS_2 . En este caso, la distancia entre capa y capa es de 0.74 nm. en lugar de la típica de 0.625 nm para un tubo de MoS_2 . Observando con mayor detalle es posible ver dentro de lo que parece ser un tubo de MoS_2 , la estructura de capas de un nanotubo de carbono, en donde las capas de grafito, aunque altamente defectuosas son evidentes. Una ampliación de la

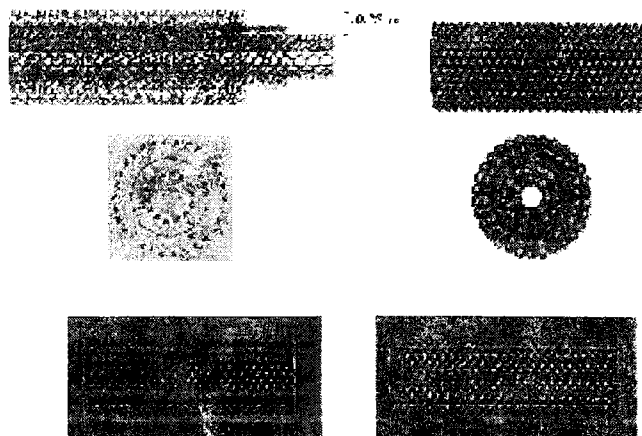


Fig. 2. Simulación Teórica de nanotubos coaxiales de MoS_2 y Carbono a través del método multicapas

micrografía permite observar líneas Moiré producidas por las redes del MoS_2 y el grafito que forman el tubo coaxial. La difracción de electrones muestra un patrón de difracción con "lunas" en la reflexión (0002) características de las estructuras tubulares, sin embargo, existe una estructura fina en estas lunas que muestra la quiralidad de un tubo respecto a otro.

Los resultados obtenidos de la simulación teórica muestran una alta concordancia con las distancias "interplanares" que se obtuvieron experimentalmente. La distancia entre capa y capa de MoS_2 expandida debido a la intercalación de una capa de grafito es de 0.75 obtenida por el método multicapas. Es necesario hacer un análisis exhaustivo de los patrones de difracción teóricos y experimentales para determinar la estructura finas de los mismos.

Conclusiones

Se obtuvieron nanotubos coaxiales de MoS_2 con carbono. Los átomos de carbono no se incluyen en la estructura de capas del MoS_2 sino que forman capas de grafito con lo que se inducen estructuras cilíndricas dentro de los templates de MoS_2 . El modelo teórico obtenido por el método Multicapas concuerda con los resultados experimentales. Aun se necesita un estudio de los defectos inducidos y de la quiralidad de los tubos a través de los patrones de difracción y su estructura fina.