



## **FUNCIONALIZAÇÃO DO GRAFENO COM A MOLECULA PHENYL**

Ellen Sabrina Silva Barbosa<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### **RESUMO**

O carbono é o elemento mais abundante na natureza e tem varios alotropos como o diamante, grafite, fullerenos, nanotubos de carbono e grafeno. Depois de sua sentetização em 2004, seu estudo e pesquisa de aplicação em varias áreas foi crescendo. O grafeno é uma camada de átomos que esta distribuido em forma hexagonal como um favo de mel, suas propriedades eletrônicas, mecânicas e térmicas trouxeram muita atenção ao mundo científico. Para ser aplicado algumas vezes tem que ser funcionalizado e na literatura existe muitos trabalhos em relação a funcionalidade do grafeno. Neste trabalho faremos um estudo teórico da funcionalização do grafeno com moléculas Phenyl nas posições não covalente e covalente como o armchair, zigzag e no centro do grafeno. Otimizamos a geometria de cada componente, calculamos suas energias totais e as energia de ligação da molécula Phenyl na superfície de grafeno para cada posição, utilizamos a dinâmica molecular clássica, usando o programa forcite e Adsorption locator embutidos no software Materials Studio. Nossos resultados nos mostram que a melhor configuração seria a não covalente com uma energia de lição de -14.43 kcal/mol, as outras posições nos dão energias positivas, mas para entender melhor precisaríamos ter em conta os efeitos quânticos.

**Palavras-chave:** Grafeno, Phenyl, Dinâmica molecular clássica.

---

<sup>1</sup>Aluna do ECI Orlando Venancio dos Santos, Cuite, PB, e-mail: [ellensabrina10@icloud.com](mailto:ellensabrina10@icloud.com)

<sup>2</sup>Doutor , Professor, UAFM, UFCEG, Cuite, PB, e-mail: [lterrazo@ufcg.edu.br](mailto:lterrazo@ufcg.edu.br)



## **GRAPHEN FUNCTIONALITY WITH PHENYL MOLECULA**

### **ABSTRACT**

Carbon is the most abundant element in nature and has several allotropes such as diamond, graphite, fullerenes, carbon nanotubes and graphene. After his sentetization in 2004, his study and application research in various areas grew. Graphene is a layer of atoms that is distributed in a hexagonal shape like a honeycomb. Its electronic, mechanical and thermal properties have brought much attention to the scientific world. To be applied sometimes it has to be functionalized and there are many works in the literature regarding the functionality of graphene. In this work we will make a theoretical study of the functionalization of graphene with Phenyl molecules in the non-covalent and covalent positions such as the armchair, zigzag and in the center of the graphene. We optimized the geometry of each component, calculated its total energies and the binding energy of the Phenyl molecule on the graphene surface for each position, using classical molecular dynamics, using the forcite and Adsorption locator program embedded in the Materials Studio software. Our results show us that the best configuration would be the non-covalent one with a binding energy of -14.43 kcal/mol, the other positions give us positive energy, but to understand better we would need to take into account the quantum effects.

**Keywords:** Graphene, Phenyl, Classical Molecular Dynamics.