



## **FUNCCIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM A MOLÉCULA DCE**

Laura Virgínia Ferreira Venâncio<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### **RESUMO**

O carbono, por ser um elemento bastante versátil e rico em quantidade na natureza, deu entrada a muitas pesquisas científicas fundamentais na área da Nanociência e Nanotecnologia. Os alótropos de carbono são diversos, dentre eles são diamante, grafite, fulereno, nanotubos de carbono e grafeno. Ao longo da história, os nanotubos de carbono chamaram muita atenção pelas diversas aplicações e utilidades em diversos meios na ciência, o que de fato levantou curiosidade fazendo surgir gradativamente muitas pesquisas sobre o assunto. Os nanotubos de carbono são folhas de grafeno enroladas e têm propriedades elétricas, metálicas, e semicondutoras dependendo de suas bordas que podem ser armchair ou zigzag. Os nanotubos de carbono são citotóxicos e têm que ser funcionalizados para suas aplicações como transportadores de fármacos para as células cancerígenas. Uma forma de funcionalizar é ligando covalentemente a superfície do nanotubo de carbono a uma molécula OCNH-fluorescein (DCE). Mostramos os comprimentos de ligação entre os átomos da molécula DCE. Calculamos a energia de ligação desse sistema utilizando a dinâmica molecular clássica. Nossos resultados nos mostram que esse sistema é instável, porque a energia de ligação é positiva.

**Palavras-chave:** Nanotubos de Carbono, Fluorescein, Dinâmica Molecular Clássica.

---

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

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

# FUNCTIONALITY OF THE CARBON NANOTUBE WITH DCE MOLECULE

## ABSTRACT

Carbon, being a very versatile element and rich in quantity in nature, gave rise to many fundamental scientific researches in the area of Nanoscience and Nanotechnology. The carbon allotropes are diverse, among them are diamond, graphite, fullerene, carbon nanotubes and graphene. Throughout history, carbon nanotubes have attracted a lot of attention for their diverse applications and uses in different media in science, which in fact has aroused curiosity and gradually led to a lot of research on the subject. Carbon nanotubes are rolled graphene sheets and have metallic and semiconductor electrical properties depending on whether their edges are armchair or zigzag. Carbon nanotubes are cytotoxic and have to be functionalized for their applications as a drug carrier for cancer cells. One way to functionalize is to covalently link the carbon nanotube surface to an OCNH-fluorescein (DCE) molecule. We show the bond lengths between the atoms of the DCE molecule. We calculate the binding energy of this system using classical molecular dynamics. Our results show us that this system is unstable, because the binding energy is positive.

**Keywords:** Carbon Nanotubes, Fluorescein, Classical Molecular Dynamics.