



## ***FUNCIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM ÁCIDO FÓLICO***

Beatriz Rocha Lima<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### **RESUMO**

Alotropia é um fenômeno que acontece com o elemento carbono, gerando dele substâncias simples: O diamante, grafite, fulereno, nanotubo de carbono e o grafeno, diferenciando-se pelo arranjo geométrico dos átomos em suas estruturas. Os nanotubos de carbono podem ser classificados em nanotubos de multicamadas e camada simples. As propriedades elétricas dependem do formato de suas bordas. Eles têm as propriedades de absorver energia térmica da radiação infravermelha e assim podem ser usados como terapia contra o câncer, pelo fato de ser hidrofóbico tem que ser funcionalizado. Neste trabalho funcionalizamos o nanotubo de carbono com a molécula do ácido fólico. Ligamos a molécula na superfície do nanotubo com uma interação não covalente e calculamos sua energia de ligação, utilizando dinâmica molecular clássica. Obtemos o valor dessa energia de  $-21.35$  kcal/mol e nos mostra que é um sistema estável.

**Palavras chaves:** Nanotubo de carbono, ácido fólico, câncer

---

<sup>1</sup>Aluna do ECI Orlando Venancio dos Santos, Cuite, PB, e-mail: [br83882@gmail.com](mailto:br83882@gmail.com)

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



## FUNCTIONALIZATION OF THE CARBON NANOTUBE WITH FOLIC ACID

### ABSTRACT

Allotropy is a phenomenon that occurs with the carbon element, generating simple substances from it: diamond, graphite, fullerene, carbon nanotube and graphene differing by the geometric arrangement of the atoms in their structures. Carbon nanotubes can be classified into multilayer and single layer. The electrical properties depend on the shape of its edges. They have the properties of absorbing thermal energy from infrared radiation and thus can be used as therapy against cancer, because it is hydrophobic it has to be functionalized. In this work, we functionalize the carbon nanotube with the folic acid molecule. We connect the molecule on the nanotube surface with a non-covalent interaction and calculate its binding energy, using classical molecular dynamics. We obtain the value of this energy of  $-21.35$  kcal / mol and it shows us that it is a stable system.

**Keyword:** Carbon nanotube, folic acid, cancer