



## **FUNCIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM A MOLECULA O ACIDO 3-PHOSPHONOPROPANOIC**

Mariana dos Santos Pinheiro<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### **RESUMO**

O carbono é um dos elementos mais abundantes na natureza e seus alótropos como o diamante, grafite, fulerenos, nanotubos de carbono e grafeno tem sido de muitos estudos ate a atualidade. Os nanotubos de carbono são nanoestruturas únicas, com propriedades eletrônicas e mecânicas notáveis, e sua alta aplicabilidade na nanotecnologia, como biossensores para a detecção do câncer do próstata. Neste trabalho, obtimos a energia de adsorção da molécula o acido 3-Phosphonopropanoic na superfície do nanotubo zigzag, usando o programa Adsorption locator e a dinâmica molecular clássica para otimizar a geometria. Apresentamos os comprimentos de ligação entre os átomos da molécula e do nanotubo de carbono. Nossos resultados nos mostram uma energia de adsorção de -104.580 kcal/mol sendo estável o sistema. Observamos que existe uma interação na ponte de hidrogênio da molécula.

**Palavras-chave:** Nanotubos de carbono, Acido 3-Phosphonopropanoic, Dinamica molecular clássica.

---

<sup>1</sup> Aluna da Ecit Jornalista José Itamar da Rocha Cândido, Cuité-PB. Email: [mp882968@gmail.com](mailto:mp882968@gmail.com)

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



## FUNCTIONALIZATION OF THE CARBON NANOTUBE WITH THE 3-PHOSPHONOPROPANOIC ACID MOLECULE

### ABSTRACT

Carbon is one of the most abundant elements in nature and its allotropes such as diamond, graphite, fullerenes, carbon nanotubes and graphene have been in many studies to date. Carbon nanotubes are unique nanostructures, with remarkable electronic and mechanical properties, and their high applicability in nanotechnology, as biosensors for the detection of prostate cancer. In this work we obtain the energy of adsorption of the molecule 3-Phosphonopropanoic acid on the surface of the zigzag nanotube, using the program Adsorption locator and the classical molecular dynamics to optimize the geometry. We present the bond lengths between the atoms of the molecule and the carbon nanotube. Our results show us an adsorption energy of -104,580 kcal / mol with the system being stable. We observed that there is an interaction in the hydrogen bridge of the molecule.

**Keywords:** Carbon nanotubes, 3-Phosphonopropanoic acid , Classic molecular dynamics