



FUNCIONALIZAÇÃO DO GRAFENO COM A MOLÉCULA DODECIL BENZENO SULFONATO DE SÓDIO E ÓXIDO DE COBRE.

José Emerson Silva Queirós¹, Luis Alberto Terrazos Javier ²

RESUMO

Um alótropo do carbono aplicado na nanotecnologia é o grafeno, que possui uma camada bidimensional, no qual seus átomos se ligam formando estruturas hexagonais. A combinação entre as propriedades do grafeno, junto com a molécula dodecil benzeno sulfonato de sódio e óxido de cobre, apresenta um papel muito importante na construção de biosensores, onde seu trabalho tem o objetivo de detectar a quantidade de frutose. Nesse contexto, o presente trabalho tem como finalidade entender a interação não covalente da molécula DBSS e o óxido de cobre, no qual nosso objetivo foi calcular a energia de absorção da molécula DBSS e do óxido de cobre na superfície do grafeno. Assim, nossos resultados foram que a molécula DBSS obteve uma energia de adsorção mais fraca, equivalente a -0,553 kcal/mol e o óxido de cobre uma energia de adsorção mais forte, que equivale a -9,293 kcal/mol.

Palavras-chave: grafeno, dodecil benzeno sulfonato de sódio, óxido de cobre.

¹Aluno do Curso de Administração, da ECIT Cuité Jornalista José Itamar da Rocha Cândido, Cuité, PB, e-mail: queirosemerson6@gmail.com

²Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.com



FUNCTIONALIZATION OF GRAPHENE WITH SODIUM DODECYL BENZENE SULFONATE MOLECULE AND COPPER OXIDE.

ABSTRACT

An allotrope of carbon applied in nanotechnology is graphene, which has a two-dimensional layer, in which its atoms are bonded to form hexagonal structures. The combination of the properties of graphene, together with the sodium dodecyl benzene sulfonate molecule and copper oxide, plays a very important role in the construction of biosensors, where their work is aimed at detecting the amount of fructose. In this context, this work aims to understand the non-covalent interaction of DBSS molecule and copper oxide, in which our objective was to calculate the absorption energy of DBSS molecule and copper oxide on the surface of graphene. Thus, our results were that the DBSS molecule obtained a weaker adsorption energy, equivalent to $-0,553$ kcal/mol, and copper oxide a stronger adsorption energy, equivalent to $-9,293$ kcal/mol.

Keywords: Graphene, sodium dodecyl benzene sulfonate, copper oxide.