



FUNCIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM A MOLÉCULA DE ÁCIDO NÍTRICO.

Jesiel Ferreira Gomes Júnior¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O nanotubo de carbono é um exemplo de alótropo de carbono que é aplicado na nanotecnologia. Esse material é formado por uma simples camada ou por múltiplas camadas de carbono que, devido a sua flexibilidade, se enrolam e formam os NTC. A molécula de ácido nítrico, acelera a oxidação do nanotubo de carbono para ser funcionalizado com o intuito de determinar a solubilidade do NTC em suspensões aquosas concentradas. Neste trabalho utilizamos um NTC (10,0) com propriedade elétrica semicondutor e uma molécula do ácido nítrico. Para calcular a energia de adsorção da molécula no CNT foi utilizado o método de Monte Carlo. Observamos que a melhor configuração encontrado foi na posição axial do NTC mais não esta no centro dele. O tipo de ligação entre o NTC e a molécula é não covalente. O valor da energia de adsorção é de -12.106 kcal/mol.

Palavras-chave: nanotubos de carbono, ácido nítrico, alótropos do carbono.

¹Aluno de Administração, Departamento de UAFM, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: jesieljunior02@gmail.com

²Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



***FUNCTIONALIZATION OF THE CARBON NANOTUBE WITH THE NITRIC
ACID MOLECULE.***

ABSTRACT

The carbon nanotube is an example of a carbon allotrope that is applied in nanotechnology. This material is made up of a single layer or multiple layers of carbon that, due to their flexibility, roll up to form the CNT. The nitric acid molecule accelerates the oxidation of the carbon nanotube to be functionalized in order to determine the solubility of CNT in concentrated aqueous suspensions. In this work we use a CNT (10.0) with semiconductor electrical properties and a nitric acid molecule. To calculate the adsorption energy of the molecule on the CNT, the Monte Carlo method was used. We observed that the best configuration found was in the axial position of the CNT but not in the center of it. The type of bond between the CNT and the molecule is non-covalent. The adsorption energy value is -12,106 kcal/mol.

Keywords: Carbon nanotube, nitric acid, carbon allotropes.