

XXI CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA
GRANDE



FUNCIONALIZAÇÃO DE NANOTUBOS DE CARBONO COM 1,4-BUTILENO TEREFALATO PARA OTIMIZAÇÃO DOS NANOCOMPOSITOS

Giovanna Maria da Silva Mendes¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O nanotubo de carbono (CNT) é uma estrutura de grande relevância, que ganhou ainda mais destaque nos últimos anos devido às suas propriedades únicas, como sua forma cilíndrica, simetria axial e quiralidade. Por si só, o CNT é extremamente estável, mas quando combinado com outros materiais, suas propriedades são amplificadas, tornando-se uma opção versátil e atraente para estudos em diversas áreas. Neste trabalho, calculamos a estrutura eletrônica do nanotubo de carbono (10,0) e do CNT funcionalizado com a molécula de 1,4-butileno tereftalato, utilizando o programa CASTEP. A geometria da molécula foi otimizada pelo programa Forcite, ambos disponíveis na plataforma Materials Studio. Os resultados obtidos mostraram que o comprimento de ligação entre o CNT e a molécula de 1,4-butileno tereftalato é de 1,477 Å. A análise da estrutura de bandas e da densidade de estados revelou a presença de um banda gap de 0,137 eV no CNT, confirmando seu caráter semicondutor. Após a funcionalização com a molécula de PBT, a banda gap aumentou para 0,239 eV, sugerindo que o sistema CNT-PBT mantém suas propriedades semicondutoras, mas com modificações significativas nas propriedades eletrônicas. A presença de bandas flat na energia de Fermi, associadas à molécula de PBT, indicam mudanças na condutividade do sistema. Além disso, a energia de ligação calculada foi de -0,04654 eV, o que confirma a estabilidade do sistema funcionalizado. Em conclusão, a funcionalização do CNT com a molécula de PBT resultou em uma alteração nas propriedades eletrônicas do nanotubo. A modificação no banda gap e a presença de estados eletrônicos próximos ao nível de Fermi apontam para a possibilidade de aplicações em dispositivos semicondutores, oferecendo novas perspectivas para o uso de CNTs funcionalizados em nanocompósitos.

Palavras-chave: Nanotubo de Carbono, 1,4-butileno tereftalato, semicondutores

¹Aluna da ECIT Jornalista José Itamar da Rocha Cândido, Cuité, PB, e-mail: giovannaabdias@gmail.com

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



**FUNCTIONALIZATION OF CARBON NANOTUBES WITH 1,4-BUTYLENE
TEREPHTHALATE FOR OPTIMIZATION OF NANOCOMPOSITES**

ABSTRACT

Carbon nanotube (CNT) is a structure of great relevance, which has gained even more prominence in recent years due to its unique properties, such as its cylindrical shape, axial symmetry, and chirality. On its own, CNT is extremely stable, but when combined with other materials, its properties are amplified, making it a versatile and attractive option for studies in a variety of areas.

In this work, we calculated the electronic structure of the carbon nanotube (10.0) and the CNT functionalized with the molecule of 1,4-butylene terephthalate, using the CASTEP program. The geometry of the molecule was optimized by the Forcite program, both available on the Materials Studio platform.

The results obtained showed that the bond length between the CNT and the 1,4-butylene terephthalate molecule is 1.477 Å. The analysis of the band structure and state density revealed the presence of a band gap of 0.137 eV in the CNT, confirming its semiconductor character. After functionalization with the molecule, the gap band increased to 0.239 eV, suggesting that the CNT-PBT system maintains its semiconductor properties, but with significant modifications in the electronic properties. The presence of flat bands in the Fermi energy, associated with the PBT molecule, indicate changes in the conductivity of the system. In addition, the calculated binding energy was -0.04654 eV, which confirms the stability of the functionalized system.

In conclusion, the functionalization of CNT with the PBT molecule resulted in a change in the electronic properties of the nanotube. The modification in the gap band and the presence of electronic states close to the Fermi level point to the possibility of applications in semiconductor devices, offering new perspectives for the use of functionalized CNTs in nanocomposites.

Keywords: Carbon Nanotube; 1,4-butylene terephthalate; semiconductors