



## **FUNCTIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM O ÁCIDO CARBOXÍLICO PARA MELHORAR AS PROPRIEDADES DOS NANOCOMPOSITOS**

Ályssa Sthefany dos Santos fonsêca<sup>1</sup>, Emmily Luiza Daniel Macêdo<sup>2</sup>, Luis alberto Terrazos Javier<sup>3</sup>

### **RESUMO**

A funcionalização dos nanotubos de carbono é uma técnica importante que permite adaptar suas propriedades para atender às necessidades específicas de diversas aplicações tecnológicas e científicas. Ela desempenha um papel fundamental na expansão do uso desses materiais inovadores em uma variedade de campos, desde eletrônica até medicina. Os nanotubos de carbono funcionalizados têm uma ampla gama de aplicações devido às suas propriedades únicas e à capacidade de ajustar suas características químicas e físicas por meio da funcionalização. Neste trabalho funcionalizamos o NTC com a molécula COOH para depois ligar a molécula octadecilamina e calculamos sua energia de ligação utilizando o programa Dmol3 que está inserido na plataforma Materials Studio. Obtivemos a energia de ligação da funcionalização sendo de -342,85 eV e da ligação com a molécula octadecilamina é de -628,91 eV, enquanto que da molécula é de 516,32 eV, sendo um processo endotérmico.

**Palavras-chaves:** Nanotubo de carbono, Octadecilamina, ácido carboxílico

---

<sup>1</sup>Aluna do Instituto O Pequeno Doutor, Cuité, PB, e-mail: [alyssafonseca06@gmail.com](mailto:alyssafonseca06@gmail.com)

<sup>2</sup>Aluna do Felipe Tiago Gome, Picuí, PB, e-mail: [emmilylu2874@gmail.com](mailto:emmilylu2874@gmail.com)

<sup>3</sup>Doutor, Professor UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: [lterrazo@ufcg.edu.br](mailto:lterrazo@ufcg.edu.br)

## ***Functionalized Carbon Nanotubes: Properties and Applications***

### **ABSTRACT**

The functionalization of carbon nanotubes is an important technique that allows adapting their properties to meet the specific needs of various technological and scientific applications. It plays a fundamental role in expanding the use of these innovative materials in a variety of fields, from electronics to medicine. Functionalized carbon nanotubes have a wide range of applications due to their unique properties and the ability to adjust their chemical and physical characteristics through functionalization. In this study, we functionalized the CNT with the COOH molecule and then bonded the octadecylamine molecule, calculating their binding energy using the Dmol3 program integrated into the Materials Studio platform. We obtained a binding energy of -342.85 eV for the functionalization and -628.91 eV for the bond with octadecylamine, while the energy of the molecule was 516.32 eV, indicating an endothermic process.

**Keywords:** Carbon nanotube, Octadecylamine, carboxylic acid.

