



NANOTUBOS DE CARBONO FUNCIONALIZADOS COM A MOLECULA AZOMETHINEYLIDES PARA ENTREGA DE MEDICAMENTOS

Daieny Larrinne Diniz Costa¹, José Matheus Pinto da Silva¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O carbono (NTC) é uma importante estrutura que há alguns anos obteve uma grande visibilidade, esse alótropo ganhou veemência devido suas características relevantes (sua estrutura cilíndrica, simetria axial e propriedades de quiralidade). O NTC independente de outros, é bastante vigoroso, porém, quando há algo que o complementa, o NTC torna-se uma boa opção para estudos diversificados, ou seja, quando o NTC é agregado à algo, suas propriedades são ampliadas. Neste trabalho calculamos a estrutura eletrônica do nanotubo de carbono (9,0), da molécula Azomethineylides e desta ligado ao NTC utilizando o programa CASTEP que está inserido na plataforma Materials Studio. Obtivemos a estrutura de bandas e a densidade de estados do NTC e do NTC funcionalizado e seu comprimento de ligação de 1.658 Å. Observamos que o NTC funcionalizado tem uma alta densidade de estados na energia de Fermi, que mostra que é um condutor de elétrons.

Palavras-chave: Nanotubo de Carbono, Funcionalização, Azomethineylides

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

e-mail: josematheuspsobrinho@gmail.com

³Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, Email: lterrazo@ufcg.edu.br

CARBON NANOTUBES FUNCTIONALIZED WITH THE AZOMETHINEYLIDES MOLECULE FOR MEDICATION DELIVERY

ABSTRACT

Carbon nanotubes (CNTs) are an important structure that gained significant visibility in recent years. This allotrope stands out due to its relevant characteristics, such as its cylindrical structure, axial symmetry, and chirality properties. CNTs, on their own, are quite robust; however, when combined with something complementary, they become an excellent option for diverse studies. In other words, when CNTs are aggregated with other materials, their properties are enhanced. In this study, we calculated the electronic structure of a carbon nanotube (9,0), the Azomethineylides molecule, and their connection to CNT using the CASTEP program, which is integrated into the Materials Studio platform. We obtained the band structure and density of states for both the pristine CNT and the functionalized CNT, with a bond length of 1.658 Å. We observed that the functionalized CNT exhibits a high density of states at the Fermi energy, indicating that it is an electron conductor.

Keywords: Carbon Nanotube; Functionalization; Azomethineylides.

