



## **ESTUDO DA FUNCIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM A MOLÉCULA DODECYL PARA ENGENHARIA DE TECIDO ÓSSEO**

**Maria Clara de Souto Nascimento Santos<sup>1</sup>, Pedro Henrique Ferreira Marques Leite<sup>1</sup> Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>.**

### **RESUMO**

O nanotubo de carbono (NTC) é um alótropo muito importante do átomo de carbono. Assim como as demais substâncias em escala nanométrica, ele possui características muito peculiares, tem uma grande resistência mecânica e boas propriedades eletrônicas e químicas. A funcionalização é uma etapa importante para viabilizar o uso do NTC sendo possível combiná-lo com outros materiais, melhorando suas propriedades e inserindo-lhes novas características. Nesse trabalho, a funcionalização foi feita com a molécula dodecyl, conferindo ao NTC um aumento da adesão celular e uma melhoria da biocompatibilidade para ser utilizado com um enxerto ósseo. Os cálculos das energias totais, da energia de ligação, e do comprimento do nanotubo, foram calculados por meio da teoria mecânica quântica que está dentro do software Castep, que está inserido na plataforma Materials Studio. As otimizações da sua geometria foram feitas pelo software Forcite. Logo, nesse artigo calculamos a energia total do NTC + Dodecyl (-18747.0 eV) e das moléculas separadamente (NTC: -5578,5 eV, Dodecyl: -2256,9 eV) a partir desses resultados foi calculado a energia de ligação do NTC+ Dodecyl que é de -246,46 eV, além de desenvolver o valor do comprimento do nanotubo de carbono que é igual a - 14,597 Å. Por fim, através dos cálculos do *Castep*, observamos a estrutura de bandas e a densidade de estados do nanotubo de carbono, que nos mostra que ele é um metal, analisamos que na densidade de estado da molécula ligada ao nanotubo de carbono, o número de estado aumenta na energia de Fermi, e a banda s tem contribuição na energia de Fermi, concluindo que a funcionalização do NTC contribuiu para o número de estados aumentar na energia de Fermi.

**Palavras-chave:** Nanotubo de carbono; Funcionalização; Dodecyl; Enxerto ósseo.

---

<sup>1</sup>Alunos do Instituto O Pequeno Doutor, Cuité, PB, e-mail: [pedromqs123@gmail.com](mailto:pedromqs123@gmail.com) - [mclara10021b@gmail.com](mailto:mclara10021b@gmail.com)

<sup>2</sup>Doutor, professor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: [lterrazo@ufcg.edu.br](mailto:lterrazo@ufcg.edu.br)

## ***STUDY OF FUNCTIONALIZATION OF CARBON NANOTUBE WITH DODECYL MOLECULE FOR BONE TISSUE ENGINEERING***

### **ABSTRACT**

Carbon nanotubes (CNTs) are a highly significant allotrope of carbon. Like other nanoscale substances, they exhibit very distinct characteristics, including high mechanical strength and excellent electronic and chemical properties. Functionalization is a crucial step to enable the use of CNTs in combination with other materials, enhancing their properties and introducing new characteristics. In this study, functionalization was performed with the dodecyl molecule, resulting in increased cellular adhesion and improved biocompatibility of CNTs for use in bone scaffold. The calculations of the total energies, binding energy, and nanotube length were carried out using quantum mechanical theory within the Castep software, which is integrated into the Materials Studio platform. Geometry optimizations were performed using the Forcite software. Therefore, in this article, we calculated the total energy of CNT + Dodecyl (-18747.0 eV) and of the molecules separately (CNT: -5578.5 eV, Dodecyl: -2256.9 eV). From these results, we calculated the binding energy of CNT + Dodecyl, which is -246.46 eV, as well as determined the length of the carbon nanotube, which is -14.597 Å. Finally, through the Castep calculations, we examined the band structure and density of states of the carbon nanotube, revealing its metallic nature. We observed that in the density of states of the molecule bound to the carbon nanotube, the number of states increased at the Fermi energy, and the s band contributed to the Fermi energy, indicating that the functionalization of CNT contributed to the increase in the number of states in the Fermi energy .

**Keywords:** Carbon Nanotube; Functionalization; Dodecyl; Bone scaffold.

