



## **FUNCIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM O B-DNA.**

Emilly Dantas da Silva<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### **RESUMO**

Um alótropo do carbono empregado na nanotecnologia é o nanotubo de carbono, onde também é aplicado na nanociência, devido a capacidade de transfecção celular dos CNTs ligados a um marcador de folato, sendo responsável por permitir que entrem nas células e atuem como um agente seletivo no tratamento de câncer. E a combinação entre as propriedades únicas dos SWNTs com a estabilidade físico-química, a rigidez mecânica e alta precisão de processabilidade do DNA, faz com que ambos sejam utilizados em aplicações médicas. Nesse contexto, o presente trabalho tem como finalidade entender a interação não covalente entre nanotubos de única camada, com segmentos sintéticos de B-DNA. Onde identificamos que a energia de adsorção varia entre os sistemas individuais formados por CNTs semicondutores e metálicos com diâmetros diferentes, permitindo também compreender o motivo de serem empregados na nanociência e na nanotecnologia. Assim como, identificamos o comprimento e o diâmetro dos SWNTs e do DNA antes da fisssorção, além da largura do material genético depois de se ligar a superfície do adsorvente por forças de Van der Waals, já que é uma adsorção física e não química. Também definimos que as energias de adsorção encontradas e a largura do B-DNA, são inversamente e diretamente proporcionais ao diâmetro dos nanotubos, respectivamente. E observamos que à medida que o diâmetro do CNT aumenta à energia de adsorção fica mais fraca e a largura do DNA também aumenta.

**Palavras-chave:** Nanotubo de Carbono, Ácido Desoxirribonucleico, Energia de Adsorção, Câncer.

---

<sup>1</sup>Aluna do curso de Informática, da ECIT Jornalista José Itamar da Rocha Cândido, Cuité, PB, e-mail: [emillyd060dantas@gmail.com](mailto:emillyd060dantas@gmail.com)

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



## **FUNCTIONALIZATION OF THE CARBON NANOTUBE WITH B-DNA.**

### **ABSTRACT**

An allotrope of carbon used in nanotechnology is the carbon nanotube, which is also applied in nanoscience, due to the cellular transfection capacity of CNTs linked to a folate marker, being responsible for allowing them to enter cells and act as a selective agent in the cancer treatment. And the combination of the unique properties of SWNTs with physicochemical stability, mechanical rigidity and high precision of DNA processability, makes them both used in medical applications. In this context, this work aims to understand the non-covalent interaction between single-layer nanotubes with synthetic segments of B-DNA. Where we identified that the adsorption energy varies between individual systems formed by semiconductor and metallic CNTs with different diameters, also allowing us to understand why they are used in nanoscience and nanotechnology. Likewise, we identified the length and diameter of SWNTs and DNA before physisorption, as well as the width of the genetic material after binding the surface of the adsorbent by Van der Waals forces, since it is a physical and not chemical adsorption. We also defined that the adsorption energies found and the width of the B-DNA are inversely and directly proportional to the diameter of the nanotubes, respectively. And we see that as the diameter of the CNT increases the adsorption energy gets weaker and the width of the DNA also increases.

**Keywords:** Carbon Nanotube, Deoxyribonucleic Acid, Adsorption Energy, Cancer.