



## **FUNCIONALIZAÇÃO DO NANOTUBO DE CARBONO COM AS MOLÉCULAS CLORETO DE OXALILA E ETILENODIAMINA**

Kessiane Santos Neves<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier <sup>2</sup>

### **RESUMO**

Desde sua descoberta, o nanotubo é uma das estruturas estudadas na nanotecnologia. Entre eles, podemos citar o nanotubo de carbono, que nada mais é do que um minúsculo cilindro formado por átomos de carbono, que pode ter apenas uma camada ou mais de uma organizada de forma concêntrica.

Neste trabalho, abordamos a aplicação de nanotubos de carbono em neurobiologia, uma vez que a funcionalização de um CNT com as moléculas cloreto de oxalila e etilenodiamina pode ser utilizada como substrato no crescimento neuronal. Funcionalizamos o CNT (10,0) semiconductor com as moléculas de cloreto de oxalila e etilenodiamina e a energia de adsorção obtida foi de -9.463 kcal/mol e -11.903 kcal/mol respectivamente.

**Palavras-chave:** Nanotubos de carbono, Cloreto de Oxalila, Etilenodiamina.

---

<sup>1</sup> Aluna concluinte do 3 ° ano do ensino médio na escola estadual ECIT José Luiz Neto, Barra de Santa Rosa, PB, e-mail: kessianeneves435@gmail.com

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



## **FUNCTIONALIZATION OF THE CARBON NANOTUBE WITH OXALYL CHLORIDE AND ETHYLENEDIAMINE MOLECULES**

### **ABSTRACT**

Since its discovery, the nanotube is one of the structures studied in nanotechnology. Among them, we can mention the carbon nanotube, which is nothing more than a tiny cylinder formed by carbon atoms, which can have only one layer or more than one organized in a concentric way. In this work, we approach the application of carbon nanotubes in neurobiology, since the functionalization of a CNT with oxalyl chloride and ethylenediamine molecules can be used as substrate in neuronal growth. We functionalized the CNT (10.0) semiconductor with molecules of oxalyl chloride and ethylenediamine and the adsorption energy obtained was -9,463 kcal/mol and -11,903 kcal/mol, respectively.

**Keywords:** Carbon nanotubes, Oxalyl Chloride, Ethylenediamine.