



Funcionalização do nanotubo de carbono com a molécula de atrazina

Samuel Marques de Souza¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

Desde 1991, quando Sumio Iijima descobriu os alótropos de carbono, eles foram cada vez mais estudados e aprimorados até chegarem ao seu potencial atual. Devido a rápida capacidade de adsorção dos nanotubos de carbono, foi feito um estudo aprimorado de como esse material reagia quando colocado dentro de uma substância aquosa contendo atrazina. A partir de todo esse estudo foi visto que os CNT tem um grande potencial abiótico para remover essa substâncias da água potável, renovando-a e a deixando pronta para o consumo. A princípio funcionalizamos o SWCNT (10,0) com a molécula atrazina e calculamos a energia de adsorção utilizando o método de montecarlo e obtemos o valor de -21.017 kcal/mol, observamos que o tipo de ligação é não covalente.

Palavras-chave: Nanotubo de carbono, Atrazina, funcionalização da superfície, adsorção.

²Aluno da ECI Orlando Venâncio dos Santos, Cuité, PB, e-mail: samuemarkesu@gmail.com

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



Functionalization of the carbon nanotube with the atrazine molecule

ABSTRACT

Since 1991, when Sumio Iijima discovered carbon allotropes, they have been increasingly studied and refined until they reach their current potential. Due to the rapid adsorption capacity of carbon nanotubes, an improved study was made of how this material reacts when placed inside an aqueous substance containing atrazine. From this entire study, it was seen that CNTs have a great abiotic potential to remove these substances from drinking water, renewing it and making it ready for consumption. At first we functionalized the SWCNT (10,0) with the atrazine molecule and we calculated the adsorption energy using the Montecarlo method and we obtained the value of -21.017 kcal/mol, we observed that the type of bond is non-covalent.

Keywords: Carbon nanotube, Atrazine, surface functionalization, adsorption.