



## ***ESTUDO DA LIGAÇÃO DA MOLÉCULA DE D-GLICOSE COM O NANOTUBO DE CARBONO FUNCIONALIZADO COM O ÁCIDO PIRENE-1-BORÔNICO***

**Wesley Janyel Cunha Silva<sup>1</sup>, Luiz Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>**

### **RESUMO**

O átomo de carbono por possuir a propriedade de tetravalência e consegue formar grandes cadeias carbônicas. Dessa forma, um alótropo de carbono no âmbito da nanotecnologia, o nanotubo de carbono são excelentes elementos de leitura ideais para sensores químicos como o NT FET. Neste contexto, o presente trabalho tem como propósito entender a interação não covalente entre um SWNT semicondutor zig-zag (10,0) funcionalizado com o ácido pirene-1-borônico em sua superfície ligado a molécula de glicose, onde a observamos que a distância entre a molécula do APB e o nanotubo de carbono de 3,748 Å corresponde a fisissorção. E concluímos que a relação da energia de adsorção entre as ligações das estruturas do SWNT-APB-G de -17,489 kcal/mol é mais fraca comparado com a energia de adsorção da estrutura SWNT funcionalizado com o APB que corresponde a -24,528 kcal/mol.

**Palavras-chave:** nanotubo de carbono, ácido borônico, D-glicose.

---

<sup>1</sup>Aluno do curso de administração, da ECIT Jornalista José Itamar da Rocha Cândido, Cuité PB, PB, e-mail: janyelsilva9@gmail.com

<sup>2</sup>Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Cuité PB, e-mail:



***STUDY OF THE LINKAGE OF D-GLUCOSE MOLECULE WITH CARBON NANOTUBE FUNCTIONALIZED WITH PYRENE-1-BORONE ACID***

**ABSTRACT**

The carbon atom has the property of tetravalence and is able to form large carbon chains. Thus, an allotrope of carbon within nanotechnology, the carbon nanotube are excellent reading elements ideal for chemical sensors such as NT FET. In this context, the present work aims to understand the non-covalent interaction between a zig-zag semiconductor SWNT (10.0) of functionalized with Boronic Acid on its surface bound to the glucose molecule, where we observe that the distance between the molecule of APB and the 3.748 Å carbon nanotube corresponds to physisorption. And we conclude that the adsorption energy ratio between the bonds of the SWNT-APB-G structures of -17.489 kcal/mol is weaker compared to the adsorption energy of the SWNT structure functionalized with boronic acid which corresponds to -24 .528 kcal/mol.

**Keywords:** carbon nanotube, boronic acid, D-glucose.