

## ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DE NANOTUBOS DE CARBONO SOLVATADOS COM ÁGUA

MATEUS AUGUSTO THEODORO RODRIGUES<sup>1</sup>;  
ROBSON DA SILVA OLIBONI<sup>2</sup>

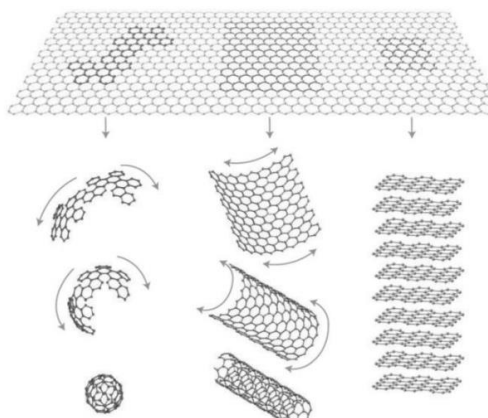
<sup>1</sup>Universidade Federal de Pelotas – UFPel, Mateus\_a.t.r@hotmail.com

<sup>2</sup>Universidade Federal de Pelotas – UFPel, rooliboni@gmail.com

### 1. INTRODUÇÃO

Os nanotubos de carbono ou carbon nanotubes (CNTs) têm despertado grande interesse da comunidade científica devido as suas características peculiares. Citados em trabalhos científicos, inicialmente, em 1991 por Sumio Iijima, os CNTs são considerados os materiais mais fortes, resistentes e flexíveis a tensões. Podem ter diversas aplicações em várias áreas da ciência como: física, química, ciências dos materiais, biologia e indústria farmacêutica. (TONEL et al., 2011)

Esses nanomateriais são alótropos do carbono que possuem propriedades elétricas que podem ser semicondutoras, metálicas ou supercondutoras (baixas temperaturas) dependendo de fatores geométricos como diâmetro e qualidade do tubo. (SOUZA FILHO et al., 2007)



**Figura 1.** Folha de Grafeno, um material de construção 2D para alótropias de carbono. Pode ser embrulhado para formar fulerenos, enrolado para formar nanotubos ou empilhado para formar grafite.

Este trabalho tem como objetivo analisar a interação de CNTs e funcionados com água por meio de simulação computacional via GROMACS

### 2. METODOLOGIA

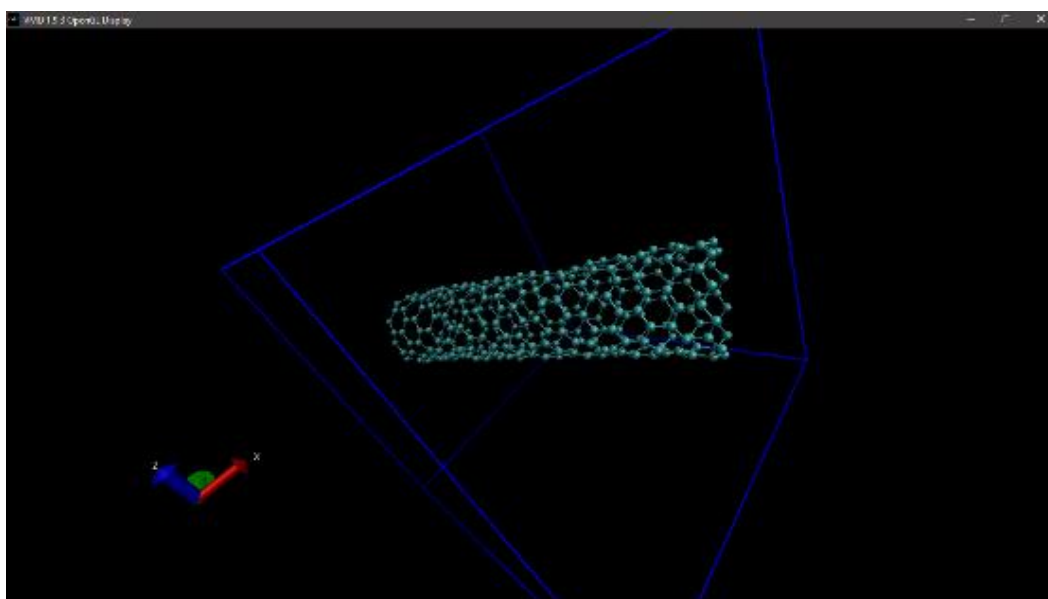
A Simulação de Dinâmica Molecular (DM) é uma das técnicas computacionais mais versáteis para o estudo de macromoléculas biológicas. No planejamento racional de fármacos baseado em estrutura, as simulações têm contribuído exaustivamente em diversos estágios do processo.

A metodologia da DM é fundamentada nos princípios da Mecânica Clássica e fornece informações sobre o comportamento dinâmico microscópico, dependente do tempo, dos átomos individuais que compõem o sistema. Para se obter as

propriedades macroscópicas de interesse a aplicação da mecânica estatística é requerida, a qual tem a função de calcular propriedades observáveis macroscópicas (pressão, energia interna, volume, temperatura, entropia, energia livre etc.), a partir de outras microscópicas. (NAMBA et al., 2008)

O objetivo básico da técnica de Dinâmica Molecular, assim como a de Monte Carlo, é observar a evolução do sistema dado através da determinação do movimento das partículas individuais. Devido às interações entre partículas, o sistema é capaz de manter tanto o equilíbrio mecânico quanto térmico, no caso de perturbações externas o sistema pode atingir uma nova configuração de equilíbrio. (RINO et al., 2001)

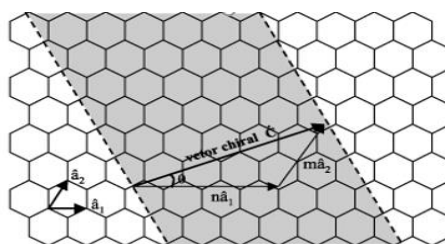
O programa usado para a DM foi o Gromacs 4.6. Foram estudados um sistema: com CNT puro com a água em vácuo. O campo de força utilizado foi o OPLS<sub>2</sub>. Resumindo os sistemas foram colocados na Box. Inicialmente, foi feita uma otimização, utilizando o algoritmo steepest-descent. Após isso, fez-se uma simulação do sistema em vácuo com dinâmica clássica sem acoplamento de pressão, à 300K. Para a simulação em água utilizou-se mesmas condições de temperatura e com pressão de  $1 \times 10^5$  Pa.



**Figura 2.** Recorte de tela do CNT no vácuo simulado pelo GROMACS via VMD (Visual Molecular Dynamics).

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

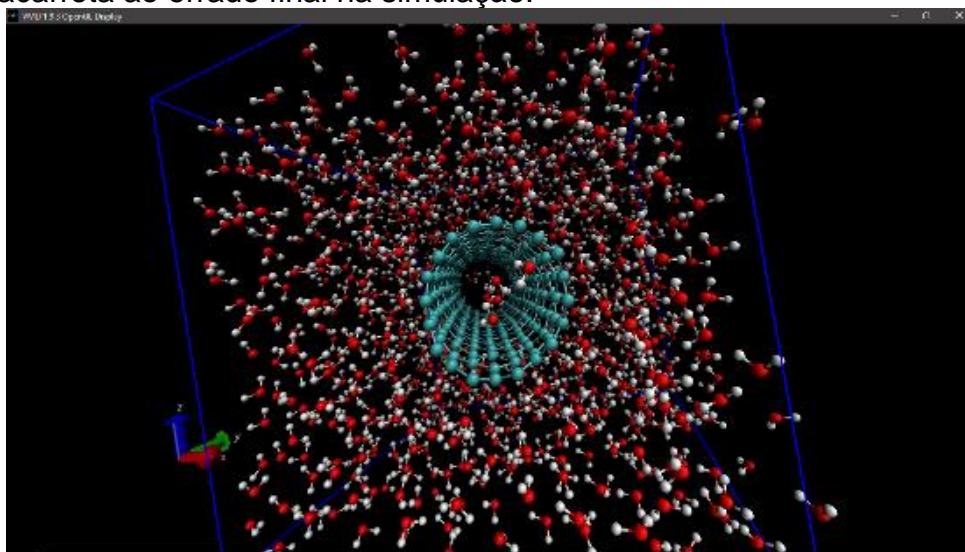
Para a simulação no vácuo, inicialmente colocamos o CNT (10,0), onde os valores em parênteses são os índices Hamada, ou seja, parâmetros de diâmetro e ângulo chiral também pode ser chamado de ângulo de helicidade do material, como demonstrado abaixo:



**Figura 3.** Diagrama da formação de nanotubos de carbono a partir de uma folha de grafite - Quim. Nova, Vol. 27, No. 6, 986-992, 2004

Seguindo mais adiante foi realizado uma solvatação em água sobre o CNT (10,0), mostrando que em ambas a simulação demonstra o CNT estabilizado.

Nota-se a importância do tamanho da Box pois o programa interpreta o CNT com uma estrutura cíclica, ou seja, imagine do lado dessa caixa inúmeras caixas iguais contendo o mesmo nanotubo com isso formado uma estrutura cíclica, porém o software não repete a box nos lados, mas é replicado CNTs em todas coordenadas. Desta forma o passo que definimos a box no início ao geramos o arquivo.gro é muito importante afinal para GROMACS, interpretação para realizar as simulações são as interações de todos os CNTs em sua volta, assim ao erramos na definição da caixa acarreta ao errado final na simulação.



**Figura 4.** Recorte de tela do CNT solvatado em água simulado pelo GROMACS via VMD (Visual Molecular Dynamics).

#### 4. CONCLUSÕES

Pode-se observar que a água interagindo com o nanotubos de carbono tem comportamento similar ao comparados com a literatura, assim para o futuro desta pesquisa será necessário a remoção das moléculas de H<sub>2</sub>O de dentro do CNT, para a partir daí podemos calcular as funções de distribuição radial ou radial distribution function (RDFs).

Na computação científica, as RDFs têm como função descrever como a densidade da matéria circundante varia em função de um ponto distinto. Mediante aos gráficos que essas funções geram será possível determinar as características físico-químicas, desta maneira podemos analisar o material e discutir qual o próximo direcionamento para este estudo teórico.

## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

TONEL, M Z; ZANELLA, I; FAGAN, S B. Estudo teórico da interação de nanotubos de carbono funcionalizados com aminoácidos. **Disciplinarum Scientia| Naturais e Tecnológicas**, v. 12, n. 1, p. 139-150, 2011.

SOUZA FILHO, A G de; FAGAN, S B. Funcionalização de nanotubos de carbono. **Química nova**, v. 30, p. 1695-1703, 2007.

RINO, J P; STUDART, N. Um potencial de interação para o estudo de materiais e simulações por dinâmica molecular. **Química Nova**, v. 24, p. 838-845, 2001.

NAMBA, Ad M; DA SILVA, V B; DA SILVA, C. H. T. P. Dinâmica molecular: teoria e aplicações em planejamento de fármacos. **Eclética Química**, v. 33, p. 13-24, 2008.  
SEGUNDO, J. E. D. V.; VILAR, E O. Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. **Revista Eletrônica de Materiais e Processos**, v. 11, n. 2, p. 54-57, 2016.