

DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE DE GERAÇÃO E VISUALIZAÇÃO DE NANOESTRUTURAS

Aluno: Marcos Paulo Moraes
Orientador: André Silva Pimentel

Introdução

A nanotecnologia está associada a diversas áreas de pesquisa e produção na escala nano (escala atômica) tais como a medicina, eletrônica, ciência da computação, física, química, biologia e engenharia dos materiais. Seu princípio básico é a construção de estruturas e novos materiais a partir dos átomos que são os tijolos básicos da natureza. Algumas das ferramentas mais importantes em Nanotecnologia são os programas computacionais para a geração, visualização e simulação de novos nanomateriais a nível molecular. Hoje em dia, existem vários programas computacionais deste tipo que funcionam apropriadamente em moléculas razoavelmente pequenas. No entanto, são escassos os programas específicos para a aplicação em moléculas grandes encontradas na Nanotecnologia. No Brasil, não existe uma única empresa de softwares ou um único software para gerar e visualizar nanomateriais. Portanto, este projeto visa a desenvolver um software único no mercado brasileiro e fomentar a recursos humanos nesta área interdisciplinar tão carente no Brasil.

Objetivos

O objetivo deste projeto é desenvolver um programa computacional para geração e visualização de estruturas químicas importantes na Nanotecnologia. O programa, escrito em C e Visual Basic (VB.NET), possibilitará ao usuário gerar e visualizar estruturas de grafenos, nanotubos, cristais, zeólitas e fulerenos. As manipulações de computação gráfica serão desenvolvidas utilizando a linguagem C e a API OpenGL. Tem-se como meta desenvolver e registrar este software em um prazo de 2 a 3 anos.

Metodologia

No projeto, tem-se desenvolvido um programa, escrito com a linguagem C, para construir nanoestruturas tais como grafenos, nanotubos, cristais, fulerenos e zeólitas. Ao passo que a interatividade do humano com o computador é implementada utilizando a linguagem Visual Basic.

As nanoestruturas de carbono, como grafenos e nanotubos, são geradas utilizando algoritmos de replicação, translação e rotação. Os grafenos são estruturas planares, em geral, formadas por átomos de carbono localizados nos vértices de hexágonos. Os hexágonos são criados através de rotação e replicação no eixo xy.

Os nanotubos de carbono são estruturas cilíndricas, sendo geradas através da rotação dos átomos de carbono dos grafenos, previamente construídos, através de um vetor quiral, representado pelos índices (n, m). Estes índices denotam o número de vetores unitários ao longo de duas direções no retículo cristalino do grafeno [1]. Se $m = 0$, os nanotubos são chamados de “zigzag”. Ao passo que, se $n = m$, eles são chamados de “braço de cadeira”. Ao contrário, os nanotubos são chamados de “quirais”.

Os fulerenos são usualmente gerados utilizando o algoritmo espiral da Teoria de Grafos encontrado na literatura. [2] Neste projeto, os fulerenos estão sendo simplesmente construídos

a partir de um banco de dados de fulerenos regulares e irregulares de até 720 carbonos produzido por este algoritmo.

As nanoestruturas de cristais e zeólitas são construídas a partir de bancos de dados cristalográficos existentes na literatura. [3,4] Nestas bases de dados tem-se a célula unitária, a menor parte de um cristal que contém suas características. Esta unidade é repetida tridimensionalmente através de operações de translação utilizando os vetores primitivos e as coordenadas das redes de Bravais, que caracterizam a estrutura atômica de um cristal. [3]

Similarmente, a base de dados cristalográfica das zeólitas contém as coordenadas de seus átomos no modelo T [4], que pode ser utilizada para construir a célula unitária através de operações de translação e rotação. Para este projeto, uma base de dados foi gerada com a célula unitária de cada zeólita e esta foi replicada utilizando os vetores de Bravais.

Utilizando técnicas de computação gráfica, foi implementado, também, um programa capaz de gerar a visualização dos arquivos de saída dos programas citados acima. Utilizando a linguagem C e a API (Interface de Programação de Aplicativos) OpenGL, esta aplicação é capaz de rotacionar, ampliar (zoom in) e reduzir (zoom out) as nanoestruturas utilizando o mouse do computador. Também é possível obter as distâncias entre os átomos, os ângulos entre átomos escolhidos e ângulos diedros.

A aplicação principal, que integra todos os subprogramas e provê a interação com o usuário, foi desenvolvida utilizando a linguagem Visual Basic. Através dela pode-se utilizar cada gerador e visualizador.

Conclusões

Tendo o software produzido neste projeto a capacidade de criar e visualizar nanoestruturas com número elevado de átomos, pode-se afirmar que o mesmo supre as necessidades expostas.

Há também a possibilidade de implementar novas rotinas que criam outras estruturas, como polímeros, sem a necessidade de alteração no código dos demais.

O programa é de fácil manuseio, podendo ser utilizado em sala de aula no ensino médio e na universidade, como um método mais interativo de ensino e aprendizagem, ou com a finalidade de preparar moléculas para simulação molecular em pesquisas acadêmicas. Percebe-se que estas ferramentas didáticas podem ser mais efetivas na aprendizagem do aluno, atraindo mais a atenção do aluno em sala de aula.

Referências

1 - http://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_nanotube. Acesso em: Setembro 2009

2 - P. W. Fowler e K. M. Rogers *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2001**, *41*, 108

3 – Base de dados dos Cristais: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/> Acesso em: Setembro 2009

4 – Base de dados das zeólitas: <http://www.iza-structure.org/databases/> Acesso em: Outubro 2009