

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. Nesse contexto, algumas das ferramentas mais importantes em Nanotecnologia são os programas computacionais para a geração, visualização e simulação de novos nanomateriais à 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.

Polímeros são materiais importantes associados a diversas áreas de pesquisa aplicada na escala nano (escala atômica). Recentemente, estes materiais tem sido aplicados em áreas inovadoras da ciência e da tecnologia e os resultados são surpreendentes na produção de nanocompósitos, biomateriais, petróleo, e outros.[1] O desenvolvimento destes materiais depende em grande parte do avanço da Química Computacional.

Objetivos

No primeiro ano do projeto foram criados métodos de geração e visualização de cristais, grafenos e nanotubos (SWNT e MWNT), zeólitas e fulerenos. A intenção desse segundo ano de projeto foi melhorar a sub-rotina para a geração e replicação de células unitárias de cristais e zeólitas, além de desenvolver uma sub-rotina para a geração de polímeros utilizando o modelo de passeio aleatório (random walk), que foi objetivo principal do projeto neste segundo ano.

O programa foi escrito em C e Visual Basic (VB.NET),[2] para geração e visualização de nanoestruturas de polímeros. As manipulações de computação gráfica foram desenvolvidas utilizando a linguagem C e a interface API OpenGL.[3]

Metodologia

Assim como no primeiro ano de projeto, tem sido desenvolvido um programa, escrito com a linguagem C, para construir nanoestruturas tais como grafenos, nanotubos, cristais e zeólitas. Ao passo que a interatividade do humano com o computador é implementada utilizando a linguagem Visual Basic .NET. [2]

Foi inserida uma nova rotina, a de geração de polímeros. Tais compostos são macromoléculas formadas de unidades repetidas de estruturas menores, os monômeros. O número de unidades estruturais repetidas numa macromolécula é chamado grau de polimerização (n). [1] No projeto, os monômeros são replicados em uma direção escolhida de forma aleatória. Este processo repetido n vezes produz nanoestruturas de polímeros amorfos. Moléculas flexíveis e enoveladas de polímeros em solução diluída podem ser simuladas utilizando o modelo de passeio aleatório com restrições da sigla em inglês SAW, *self-avoiding walk*. [4]

Resultados

No programa, o usuário insere as dimensões (em nanômetro) da caixa que será contido o polímero e preenche uma entre três opções: quantidade de carbono, quantidade de monômeros ou massa molecular. Com uma das três alternativas preenchidas, o tamanho do polímero é calculado e uma rotina de crescimento é chamada. Dado um monômero, escolhe-se aleatoriamente uma entre as direções possíveis para o crescimento do polímero, respeitando as condições de ângulo entre as cadeias e self-avoiding walk. Se uma direção escolhida é aceita, o monômero é replicado nessa direção e o processo é refeito em modo de loop, até que se atinja o tamanho escolhido pelo usuário. Caso a direção não seja aceita, uma nova direção é escolhida, também de forma aleatória, e o teste de aceitação é refeito. Caso ainda assim, após muitas tentativas, a direção escolhida não é aceita, uma parte do polímero é descartada e novas direções são escolhidas, de modo que o número de monômeros desejados possa ser atingido.

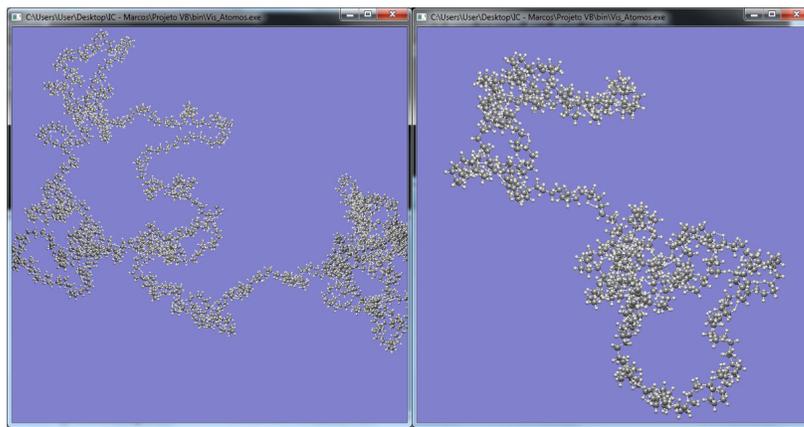


Figura 2: Visualização de dois polímeros gerados pelo programa

A aplicação principal, que integra todos os subprogramas e provê a interação com o usuário, foi desenvolvida utilizando a linguagem Visual Basic.

Conclusões

O objetivo principal do projeto foi alcançado. O programa gera polímeros amorfos, de forma competente, levando em consideração o número de tentativas e a eficiência do algoritmo de passeio aleatório com restrições (SAW).[4,5]

O programa pode ser incrementado com diferentes tipos de monômeros e polímeros. E é facilmente integrado ao programa principal. Sua utilização é simples e serve como base de dados para aplicações que simulem polímeros.

Referências

- 1 – Teegarden, D. M. Polymer Chemistry: Introduction to an Indispensable Science, NSTA Press, 2004.
- 2 – Wright, R. S. Haemel, N. Sellers, G. Lipchak, B. OpenGL SuperBible: Comprehensive Tutorial and Reference, 5th ed, Addison-Wesley Professional, 2010.
- 3 – Valiev, S. Microsoft Visual Basic .NET Programming Fundamentals, Frontenac; 1st ed., 2008.
- 4 – Frenkel, D.; Smit, B. Understanding Molecular Simulation, 2nd ed.: From Algorithms to Applications, Academic Press; 2nd ed., 2001.
- 5 – Madras, N.; Sokal, A. D. The pivot algorithm: A highly efficient Monte Carlo method for the self-avoiding walk, J. Stat. Phys. 50, 1-2, 109-186, 1988.