

Modelagem de Nanomáquinas

Adjane Dalvana Sampaio Branches^a (LQTC- UFAM), Kelson Mota Teixeira de Oliveira^b
(LQTC- UFAM)

^a *adjanesampaio@gmail.com*

^b *kelsonmota@gmail.com*

Palavras-chave: Softwares Gráficos De Modelagem Molecular, Nanomáquinas, Engenharia Molecular, Química Teórica Computacional.

INTRODUÇÃO

No mundo atual há grande proliferação de máquinas que vão desde as mais usuais como cafeteiras e máquinas de lavar, até as mais sofisticadas assim como colisores de partículas de alta energia e espectrômetros variados. Essas máquinas pertencentes ao mundo macroscópico realizam alguma forma de trabalho quando lhes é fornecida energia. Entretanto, há ainda as que pertencem a um ramo diferente, com design diferente, que atuam no mundo microscópico, nos biosistemas. Nos últimos anos, uma nova classe existente têm sido pesquisada, em escala três vezes menor que as biomáquinas: as nanomáquinas ou máquinas moleculares (10^{-9} m)¹. Especula-se que dentro de alguns anos, será tangível criar máquinas inteligentes, capazes de combater doenças e distúrbios no sítio celular exato de sua manifestação. Mas, a pesquisa atual nesse campo ainda encontra-se em fase inicial, com propostas apresentadas por abordagem puramente teórica. Sendo assim, esse novo e fascinante mundo da engenharia molecular é a mais nova faceta da química que vai ditar os rumos da tecnologia neste século.

METODOLOGIA

A metodologia aplicada consiste em uma abordagem teórica-computacional a partir do uso de softwares gráficos de modelagem molecular, com os quais foram criados inputs básicos necessários a cálculos mecânico-quânticos, aplicados às nanoestruturas.

Software: Pacote Gaussian 03WTM; Visualizador Gráfico Gauss03 ViewTM; Interface Gráfica de Modelagem Molecular ACD/LABSTM.

Hardware: Microcomputadores IntelTM Quadicore, com plataforma Windows e Linux Debian, v. 5.0 RAM, existentes no Laboratório de Química Teórica Computacional.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Durante toda a aplicação do projeto, houve um levantamento das principais nanomáquinas já existentes, sejam elas apenas em abordagem de cunho puramente teórico, ou sintetizadas. Dentre as já sintetizadas estão alguns nanoveículos, que ao serem expostos a altas temperaturas (170°C - 200°C) sobre uma superfície de ouro, realizam movimentos em duas dimensões.²

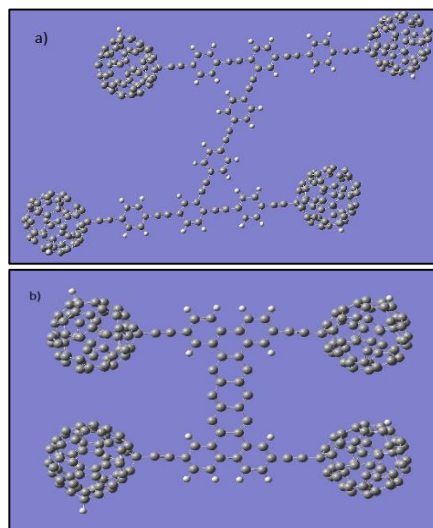


Figura 1. Alguns nanoveículos deste trabalho: a) nanocarro molecular, b) nanocaminhão molecular.

CONCLUSÕES

Através deste projeto foi possível identificar a importância dos programas de modelagem computacional no tocante a criar, ou verificar novos nanocompostos. Sem eles não seria possível, por exemplo, comprovar que mesmo sendo compostos dos mesmos átomos (carbono e hidrogênio) as estruturas apresentam características energéticas diferentes.

¹ C. M. Ronconi. *Ciência Hoje*, 48 (2011) 284.

² Y. Shirai; A.J. Osgood; Y. Zhao; K. F. Kelly e J. M. Tour. *Nano Letters*, 5 (2005) 11.