

## Front Matter / Elementos Pré-textuais / Páginas Iniciais

Luiz Carlos Gomide Freitas  
Guedmiller Souza de Oliveira  
(orgs.)

SciELO Books / SciELO Livros / SciELO Libros

FREITAS, L.C.G., and OLIVEIRA, G.S., orgs. *Aplicações de química teórica no estudo de materiais: métodos in silico para nanomateriais* [online]. São Carlos: EdUFSCar, 2018, pp. 1-8. ISBN 978-65-80216-12-3. Available from: doi: [10.7476/9786580216123](https://doi.org/10.7476/9786580216123). Also available in ePUB from: <http://books.scielo.org/id/nvnjd/epub/freitas-9786580216123.epub>.



All the contents of this work, except where otherwise noted, is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International license](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Todo o conteúdo deste trabalho, exceto quando houver ressalva, é publicado sob a licença [Creative Commons Atribuição 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Todo el contenido de esta obra, excepto donde se indique lo contrario, está bajo licencia de la licencia [Creative Commons Reconocimiento 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

# **APLICAÇÕES DE QUÍMICA TEÓRICA NO ESTUDO DE MATERIAIS**



REITORA Wanda Aparecida Machado Hoffmann  
VICE-REITOR Walter Libardi  
DIRETOR DA EDUFSCAR Igor José de Renó Machado

EdUFSCar - Editora da Universidade Federal de São Carlos

CONSELHO EDITORIAL Ana Lúcia Brandl  
Alessandra de Almeida Lucas  
Arthur Autran Franco de Sá Neto  
Gladis Maria de Barcellos Almeida  
Igor José de Renó Machado (Presidente)  
Larissa Pires de Andrade  
Maria Leonor Ribeiro Casimiro Lopes Assad  
Odete Rocha  
Piero de Camargo Leirner

**EdUFSCar**

**25**

**A N O S**

**DESDE 1993**

---

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
Editora da Universidade Federal de São Carlos  
Via Washington Luís, km 235  
13565-905 - São Carlos, SP, Brasil  
Telefax (16) 3351-8137  
[www.edufscar.com.br](http://www.edufscar.com.br)  
[edufscar@ufscar.br](mailto:edufscar@ufscar.br)  
Twitter: @EdUFSCar  
Facebook: @editora.edufscar

# APLICAÇÕES DE QUÍMICA TEÓRICA NO ESTUDO DE MATERIAIS

métodos *in silico* para nanomateriais

Luiz Carlos Gomide Freitas  
Guedmiller Souza de Oliveira  
(Organizadores)



© 2018, dos autores

**Capa**

Renan Alcantara

**Projeto gráfico**

Vitor Massola Gonzales Lopes

**Preparação e revisão de texto**

Marcelo Dias Saes Peres

Daniela Silva Guanais Costa

Vivian dos Anjos Martins

**Editoração eletrônica**

Walklenguer Oliveira

Bianca Brauer

**Coordenadoria de administração, finanças e contratos**

Fernanda do Nascimento

**Apoio**

FAPESP

Processo nº 2017/15292-8, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP). As opiniões, hipóteses e conclusões ou recomendações expressas neste material são de responsabilidade dos autores e não necessariamente refletem a visão da FAPESP.

Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da Biblioteca Comunitária da UFSCar

---

F866a Freitas, Luiz Carlos Gomide.  
Aplicações de química teórica no estudo de materiais : métodos in silico para nanomateriais / Luiz Carlos Gomide Freitas, Guedmiller Souza de Oliveira. -- São Carlos : EdUFSCar, 2018.  
244 p.

ISBN – 978-85-7600-500-1

1. Físico-química. 2. Métodos computacionais. 3. Química quântica. 4. Dinâmica molecular. 5. Nanomateriais  
I. Título.

CDD – 541 (20\*)

CDU – 541.1

---

Todos os direitos reservados. Nenhuma parte desta obra pode ser reproduzida ou transmitida por qualquer forma e/ou quaisquer meios (eletrônicos ou mecânicos, incluindo fotocópia e gravação) ou arquivada em qualquer sistema de banco de dados sem permissão escrita do titular do direito autoral.

# SUMÁRIO

## PREFÁCIO 9

## 1 DINÂMICA MOLECULAR DE BORN-OPPENHEIMER: METODOLOGIA E APLICAÇÕES EM MECANISMOS E SELETIVIDADES DE REAÇÕES QUÍMICAS 13

Miguel Angelo F. de Souza e Ricardo L. Longo

### 1.1 INTRODUÇÃO 15

### 1.2 BREVE INTRODUÇÃO À METODOLOGIA BOMD 16

1.2.1 Integrando as equações de movimento 18

1.2.2 Algoritmo predictor-corrector com base na aproximação harmônica local 18

1.2.3 Comparações entre algoritmos de propagação 21

### 1.3 SELECIONANDO A SUPERFÍCIE DE ENERGIA POTENCIAL 23

1.3.1 Métodos de estrutura eletrônica 24

1.3.2 Métodos pós-HF 25

1.3.3 Métodos alternativos 26

1.3.4 Métodos para simulação de trajetórias quase clássicas em dinâmica direta 28

1.3.5 Condições iniciais das trajetórias 30

1.3.6 Reações unimoleculares 31

1.3.7 Reações bimoleculares 34

1.3.8 Amostragem a partir do estado de transição (TS) 35

1.3.9 Crítica à literatura: dinâmica *ab initio* 37

1.3.10 Comparações com a dinâmica quântica: limitações da BOMD 38

1.3.11 Programas para simulações BOMD 38

### 1.4 EXPLORANDO MECANISMOS E SELETIVIDADES DE REAÇÕES QUÍMICAS 39

1.4.1 Reação de desidratação do álcool pinacolílico protonado: mecanismo dirigido pela dinâmica 41

1.4.2 Resultados da superfície de energia potencial 42

1.4.3 Resultados das simulações de BOMD 42

1.4.4 Comportamento estático *versus* dinâmico 47

- 1.4.5 A reação  $\text{CH}_3\text{ONO}_2 + \text{OH}^-$ : seletividade dirigida pela dinâmica 48
- 1.4.6 Resultados da superfície de energia potencial combinados com cálculos RRKM 50
- 1.4.7 Resultados das simulações BOMD 51
- 1.4.8 Comportamento fora das condições estatísticas na reação  $\text{CH}_3\text{ONO}_2 + \text{OH}^-$  55
- 1.4.9 Conclusão e perspectivas 55

REFERÊNCIAS 56

## **2 ALGORITMOS PARA O MÉTODO MONTE CARLO QUÂNTICO: O AJUSTE VARIACIONAL 63**

Rogério Custodio

- 2.1 INTRODUÇÃO 65
  - 2.2 DESCRIÇÃO GERAL DO MCV 67
  - 2.3 UTILIZANDO O ALGORITMO DE METROPOLIS 70
  - 2.4 DEFININDO A FUNÇÃO DE ONDA TENTATIVA 73
  - 2.5 CONSTRUINDO DETERMINANTES DE SLATER 76
  - 2.6 FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO EXPLÍCITAS 78
  - 2.7 EXPRESSÕES PARA O CÁLCULO DA ENERGIA CINÉTICA 80
  - 2.8 O GRADIENTE E O LAPLACIANO DE UM DETERMINANTE DE SLATER 84
  - 2.9 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO DE PARÂMETROS DAS FUNÇÕES DE ONDA 86
  - 2.10 PERSPECTIVAS E APLICAÇÕES DO MCV 90
- REFERÊNCIAS 93

## **3 ESTUDO DE ESTRUTURA DE LÍQUIDOS PELO MÉTODO EPSR 99**

João Manuel Marques Cordeiro

- 3.1 INTRODUÇÃO 101
  - 3.2 EMPIRICAL POTENTIAL STRUCTURE REFINEMENT 103
  - 3.3 EPSR EM N-METILFORMAMIDA 107
  - 3.4 EPSR NA MISTURA N-METILFORMAMIDA-DIMETILSULFÓXIDO 111
  - 3.5 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS 115
- REFERÊNCIAS 115

## **4 DESENVOLVIMENTO DE NANODISPOSITIVOS BASEADOS EM BIOMOLÉCULAS: ABORDAGENS COMPUTACIONAIS 117**

Eduardo de Faria Franca, Guedmiller Souza de Oliveira, Jéssica Cristiane Magalhães Ierich, Ana Carolina Araújo Vig, Caroline P. Brandini, Ariana de Souza Moraes e Fábio de Lima Leite

- 4.1 INTRODUÇÃO 119
- 4.2 NANOBIOSENSORES E APLICABILIDADE 120
  - 4.2.1 Microscopia de tunelamento 120
  - 4.2.2 Microscopia de força atômica 122
  - 4.2.3 Desenvolvimento de nanobiossensores: imobilização de biomoléculas em nanossuperfícies 124

4.2.4	Técnicas computacionais aplicadas ao estudo e à representação de compostos imobilizados	124
4.2.5	Modelagem por homologia	127
4.2.6	Docking molecular	134
4.2.7	Dinâmica molecular	137
4.2.8	Cálculos híbridos de mecânica quântica e mecânica molecular	138
4.2.9	Steered Molecular Dynamics (SMD)	140
<b>4.3</b>	<b>APLICAÇÃO DAS TÉCNICAS COMPUTACIONAIS NOS ESTUDOS DE MICROSCOPIA DE FORÇA ATÔMICA E PANORAMA ATUAL DAS PESQUISAS</b>	<b>142</b>
<b>4.4</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>145</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>146</b>

## **5 MODELAGEM COMPUTACIONAL DE LÍQUIDOS IÔNICOS 157**

Luciano T. Costa e Eudes Eterno Fileti

<b>5.1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>159</b>
<b>5.2</b>	<b>METODOLOGIAS COMPUTACIONAIS</b>	<b>161</b>
<b>5.3</b>	<b>DINÂMICA MOLECULAR ATOMÍSTICA</b>	<b>162</b>
<b>5.4</b>	<b>CÁLCULO DE PROPRIEDADES</b>	<b>163</b>
5.4.1	Estruturais	163
5.4.2	Dinâmicas	165
<b>5.5</b>	<b>DINÂMICA MOLECULAR COARSE-GRAINED</b>	<b>169</b>
<b>5.6</b>	<b>MODELAGEM DE LÍQUIDOS IÔNICOS: APLICAÇÕES</b>	<b>170</b>
5.6.1	Solvatação em líquidos iônicos	170
5.6.2	Captura e separação de gases	173
<b>5.7</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>178</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>179</b>

## **6 ESTUDO COMPUTACIONAL DE NANOTUBOS DE $[(\text{SnO}_2)_n]_m$ 185**

José Divino Santos e Júnio César Fonseca Silva

<b>6.1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>187</b>
<b>6.2</b>	<b>METODOLOGIA E MÉTODOS</b>	<b>188</b>
<b>6.3</b>	<b>ANÁLISES DE RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	<b>198</b>
<b>6.4</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>224</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>225</b>

## **7 SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR DA ENZIMA CRUZAÍNA DO *TRYPANOSOMA CRUZI* 227**

Osmair Vital de Oliveira

<b>7.1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>229</b>
<b>7.2</b>	<b>DOENÇA DE CHAGAS</b>	<b>230</b>
<b>7.3</b>	<b>PROTOCOLO DE DINÂMICA MOLECULAR</b>	<b>233</b>



<b>7.4 ANÁLISES DE DINÂMICA MOLECULAR</b>	<b>235</b>
7.4.1 Análise estrutural	235
7.4.2 Ligações de hidrogênio	238
7.4.3 Análise do sítio ativo	239
7.4.4 Geração de <i>ensemble docking</i>	240
<b>7.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>241</b>
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>242</b>