



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS
UNIDADE UNIVERSITÁRIA DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLÓGICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO STRICTO SENSU EM CIÊNCIAS
MOLECULARES



DIEGO DOMINGOS SILVA

**ESTUDO TEÓRICO DE NANOTUBOS DE CARBETO DE SILÍCIO (SiC) COMO
MATERIAL PROMISSOR PARA FORMAÇÃO DE ESPÉCIES REATIVAS DE
OXIGÊNIO PARA COMBATE AO SARS-COV-2**

Anápolis – GO
2025

DIEGO DOMINGOS SILVA

ESTUDO TEÓRICO DE NANOTUBOS DE CARBETO DE SILÍCIO (SiC) COMO MATERIAL PROMISSOR PARA FORMAÇÃO DE ESPÉCIES REATIVAS DE OXIGÊNIO PARA COMBATE AO SARS-COV-2

Dissertação de mestrado apresentada ao programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Ciências Moleculares – Nível mestrado, oferecido pela Universidade Estadual de Goiás – Câmpus Central: Sede – Anápolis – CET – UEG, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências Moleculares.
Área de Concentração: Química Teórica

Orientador (a): Prof. Dr. José Divino dos Santos

Anápolis – GO

2025

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da UEG
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

De Domingos Silva, Diego
ESTUDO TEÓRICO DE NANOTUBOS DE CARBETO DE SILÍCIO
(SiC) COMO MATERIAL PROMISSOR PARA FORMAÇÃO DE
ESPÉCIES REATIVAS DE OXIGÊNIO PARA COMBATE AO
SARS-COV-2 / Diego Domingos Silva; orientador José
Divino dos Santos. -- , 2025.
72 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação
Mestrado Acadêmico em Ciências Moleculares) -- Câmpus
Central - Sede: Anápolis - CET - HENRIQUE SANTILLO,
Universidade Estadual de Goiás, 2025.

1. Nanotubos . 2. Carbetos de Silício. 3.
Funcionalização. I. dos Santos, José Divino , orient.
II. Título.



Universidade
Estadual de Goiás



ESTADO DE GOIÁS
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS - UEG
COORDENAÇÃO STRICTO SENSU CIÊNCIAS MOLECULARES

DOCUMENTOS

ESTUDO TEÓRICO DE NANOTUBOS DE CARBETO DE SILÍCIO (SIC) COMO MATERIAL PROMISSOR PARA FORMAÇÃO DE ESPÉCIES REATIVAS DE OXIGÊNIO PARA COMBATE AO SARS-COV-2

DIEGO DOMINGOS SILVA

Dissertação apresentada ao Programa de Mestrado em Ciências Moleculares do Câmpus Central - Sede: Anápolis de Ciências Exatas e Tecnológicas Henrique Santillo da Universidade Estadual de Goiás, apresentada como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Ciências Moleculares.

Aprovada em 06/03/2025 por:

Prof. Dr. José Divino dos Santos

Prof. Dr. Prof. Dr. Olacir Alves de Araújo

Prof. Dr. Prof. Dr. Marcos Reis Vargas

ANAPOLIS, aos 18 dias do mês de fevereiro de 2025.



Documento assinado eletronicamente por **DIEGO DOMINGOS SILVA, Usuário Externo**, em 28/03/2025, às 16:20, conforme art. 2º, § 2º, III, "b", da Lei 17.039/2010 e art. 3ºB, I, do Decreto nº 8.808/2016.



Documento assinado eletronicamente por **JOSE DIVINO DOS SANTOS, Docente de Ensino Superior**, em 03/06/2025, às 17:39, conforme art. 2º, § 2º, III, "b", da Lei 17.039/2010 e art. 3ºB, I, do Decreto nº 8.808/2016.



Documento assinado eletronicamente por **OLACIR ALVES ARAUJO, Docente de Ensino Superior**, em 03/06/2025, às 21:42, conforme art. 2º, § 2º, III, "b", da Lei 17.039/2010 e art. 3ºB, I, do Decreto nº 8.808/2016.



Documento assinado eletronicamente por **Marcos dos Reis Vargas, Usuário Externo**, em 05/06/2025, às 15:35, conforme art. 2º, § 2º, III, "b", da Lei 17.039/2010 e art. 3ºB, I, do Decreto nº 8.808/2016.



A autenticidade do documento pode ser conferida no site http://sei.go.gov.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=1 informando o código verificador **70906473** e o código CRC **A2C924E4**.

COORDENAÇÃO STRICTO SENSU CIÊNCIAS MOLECULARES
RODOVIA BR 153 S/Nº, QUADRA ÁREA KM 99 - Bairro ZONA RURAL - ANAPOLIS -
GO - CEP 75132-903 - (62)8408-7538.



Referência: Processo nº 202500020000745



SEI 70906473

Este trabalho é dedicado a todos que, de alguma maneira, contribuíram para a realização desta pesquisa, de maneira direta ou indireta, saiba que os mais sinceros votos de agradecimento são depositados aqui nesta seção.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de iniciar os agradecimentos pontuando os esforços dedicados pela minha família no intuito de me auxiliar na realização deste trabalho. Em especial gostaria de agradecer minha esposa por toda a paciência e resiliência no esforço de me produzir o tempo e a tranquilidade necessários para minha dedicação a este projeto.

Gostaria de agradecer aos meus filhos por me produzirem, mesmo inconscientemente, a motivação para conseguir perseverar nesta empreitada.

Agradeço ainda a Universidade pela oportunidade e a meu orientador por me fornecer ferramentas que me ajudaram a me desenvolver nessa área de pesquisa e, conseqüentemente, me tornar mestre nesta matéria.

Agradeço ainda a qualquer pessoa que me ofereceu seu conhecimento, sua paciência, sua força, enfim, gostaria de agradecer a todos por tornarem minha caminhada possível.

'O sucesso nasce do querer, da determinação e persistência em se chegar a um objetivo. Mesmo não atingindo o alvo, quem busca e vence obstáculos, no mínimo fará coisas admiráveis'.

José de Alencar

RESUMO: Os nanotubos de Carbetto de Silício (SiCNT) são o foco principal deste trabalho. Os modelos foram gerados utilizando algoritmos escritos em linguagem de programação shell bash e AWK. Para otimização do modelo, cálculos semi empíricos foram realizados com o pacote MOPAC 2016 e cálculos em nível de HF e DFT, foram realizados utilizando funcionais híbridos B3LYP (Becke Three Parameter Hybrid Functionals, Lee-Yang-Parr), CAMB3LYP(Counterpoise Corrected for Adsorption Mode - Becke Three Parameter Hybrid Functionals, Lee-Yang-Parr) e B3PW91 (Becke 3-parameter Perdew-Wang 91) e base 3-21G, 6-21G, 6-31G e 6-311G. O gap da estrutura otimizada foi determinado pela diferença $|HOMO - LUMO|$, com a intenção de determinar a condutividade do modelo de nanotubo e compará-la com valores experimentais pesquisados. Descritores de otimização estrutural como distância de ligação, diâmetro e comprimento do modelo foram determinados, além de descritores moleculares quânticos como dureza global, eletronegatividade, índice de eletrofilicidade, suavidade química e potencial químico. A dinâmica das interações do SiCNT com as moléculas de H_2O e 3O_2 foi estudado nesse trabalho e os cálculos da transferência fracionada de elétrons, os deslocamentos de energia individual do doador e do aceitador foram calculados. O modelo de SiCNT otimizado foi do tipo zig-zag apresentando fórmula $Si_{48}C_{48}H_{16}$, diâmetro do tubo de 8,3 Å, comprimento de 16,71 Å, comprimento de ligação Si - C de 1,72 Å, o gap determinado pelo método HF base 6-311G apresentou um valor foi de 2,67 eV e influenciou na escolha, por sua proximidade com valor experimental pesquisado, do método HF. Os valores dos descritores moleculares encontrados foram afinidade eletrônica de 1,96 eV, energia de ionização de 4,37 eV, potencial químico de -3,165 eV, eletronegatividade de 3,165 eV, dureza global de 1,205 eV, índice de eletrofilicidade de 4,156 eV e suavidade de 0,830 eV. A análise destes parâmetros de descrição molecular indicou características favoráveis para a estrutura interagir com as moléculas de água e oxigênio e gerar espécies funcionalizadas. A interação entre o modelo a molécula de H_2O e a molécula de 3O_2 produziu os radicais SiCNT-OH-H, SiCNT-O₂, SiCNT-O₂H-OH com variações de energia favoráveis. Posteriormente o docking molecular foi calculado entre os modelos radicalares e a proteína Spike do SARS-CoV-2, apresentando valores de variações de energia e de afinidade que tornam válido o estudo proposto.

Palavras-Chave: Nanotubo, Carbetto de Silício, Espécies reativas de oxigênio.

ABSTRACT: Silicon Carbide Nanotubes (SiCNT) are the main focus of this work. The models were generated using algorithms written in shell bash and AWK programming languages. For model optimization, semi-empirical calculations were performed with the MOPAC 2016 package for HF and DFT, calculations were performed using B3LYP (Becke Three Parameter Hybrid Functionals, Lee-Yang-Parr), CAMB3LYP (Counterpoise Corrected for Adsorption Mode - Becke Three Parameter Hybrid Functionals, Lee-Yang-Parr) and B3PW91 (Becke 3-parameter Perdew-Wang 91) hybrid functionals and 3-21G, 6-21G, 6-31G and 6-311G basis. The band gap of the optimized structure was determined by the |HOMO - LUMO| difference, with the intention of determining the conductivity of the nanotube model and comparing it with experimental values. Structural optimization descriptors such as bond distance, diameter and length of the model were determined, in addition to quantum molecular descriptors such as global hardness, electronegativity, electrophilicity index, chemical softness and chemical potential. The dynamics of the interactions of SiCNT with H₂O and ³O₂ molecules were studied in this work and the calculations of the fractional electron transfer, the individual energy shifts of the donor and acceptor were calculated. The optimized SiCNT model was of the zig-zag type with formula Si₄₈C₄₈H₁₆, tube diameter of 8.3 Å, length of 16.71 Å, Si - C bond length of 1.72 Å, the band gap determined by the HF method based on 6-311G presented a value of 2.67 eV and influenced the choice of the HF method, due to its proximity to the experimental value studied. The values of the molecular descriptors found were electron affinity of 1.96 eV, ionization energy of 4.37 eV, chemical potential of -3.165 eV, electronegativity of 3.165 eV, global hardness of 1.205 eV, electrophilicity index of 4.156 eV and softness of 0.830 eV. The analysis of these molecular description parameters indicated favorable characteristics for the structure to interact with water and oxygen molecules and generate functionalized species. The interaction between the H₂O molecule model and the ³O₂ molecule produced the SiCNT-OH-H, SiCNT-O₂, SiCNT-O₂H-OH radicals with favorable energy variations. Subsequently, molecular docking was calculated between the radical models and the SARS-CoV-2 Spike protein, presenting values of energy and affinity variations that make the proposed study valid.

Keywords: Nanotube, Silicon Carbide, Reactive oxygen species.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Número de artigos científicos por ano.	17
Figura 2.2 - Variações dos nanotubos de carbono.....	19
Figura 2.3 - Nanotubo de carbeto de silício: a - arranjo do tipo armchair; b - arranjo do tipo zigzag.....	20
Figura 4.1 Fluxograma das etapas realizadas	24
Figura 4.2 Nanotubo de Carbeto de Silício.....	25
Figura 5.1 Nanotubo de Carbeto de Silício com indicação da média do comprimento de ligação e da média do ângulo de ligação.....	31
Figura 5.2 - Interação da água (H ₂ O) com o SiCNT.....	42
Figura 5.3 - Interação do Oxigênio (O ₂) com o SiCNT.....	43
Figura 5.4 - Interação por etapas do modelo de SiCNT com a água (H ₂ O) e posteriormente com o Oxigênio (O ₂).....	45
Figura 5.5 - Proteína Spike 6VXX do SARS-CoV-2.....	47
Figura 5.6 - Interação do SiCNT puro com a proteína Spike.....	49
Figura 5.7 - Interação do SiCNT-OH-H com a proteína Spike.....	50
Figura 5.8 - Interação do SiCNT-O ₂ com a proteína Spike.....	51
Figura 5.9 - Interação do SiCNT-OOH-OH com a proteína Spike.....	52

LISTA DE TABELA

Tabela 5.1. Comparação das médias de comprimento de Ligação (Å), Ângulos de ligação e Ângulos Torção (°) em relação base, métodos e funcionais híbridos	35
Tabela 5.2. Comparação dos HOMO, LUMO e <i>band gap</i> (eV) em relação a métodos, funcionais híbridos e bases.....	36
Tabela 5.3. Comparação dos HOMO, LUMO e band gap (eV) em relação a métodos, funcionais híbridos e bases. Valores de comprimento de ligação e ângulo (Å) da água e oxigênio.....	37
Tabela 5.4. Descritores moleculares quânticos obtidos por meio dos parâmetros de reatividade EHOMO e ELUMO utilizando cálculos HF/6-311G.....	39
Tabela 5.6: Parâmetros de Docking e Interações Moleculares entre os Modelos de SiCNT e a Proteína Spike (PDB: 6VXX), incluindo Energia de Interação.....	48

LISTA DE ABREVIATURAS

SARS - CoV - 2 - Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2

CNT - Nanotubo de carbono

SiCNT - Nanotubo de Carbetto de Silício

NT - Nanotubos

MOPAC - Molecular Orbital PACKage

DFT - Teoria do Funcional de Densidade

HOMO - Orbital molecular ocupado de maior energia

LUMO - Orbital molecular desocupado de menor energia

B3LYP - Becke Three Parameter Hybrid Functionals, Lee-Yang-Parr

IE - Energia de ionização

EA - Afinidade eletrônica

nat - quantidade de átomos por estrutura não saturada

CAM-B3LYP - Counterpoise Corrected for Adsorption Mode - Becke Three Parameter Hybrid Functionals, Lee-Yang-Parr

B3PW91 - Becke 3-parameter Perdew-Wang 91

HF - Método Hartree - Fock

LISTA DE SÍMBOLOS

η - dureza global

χ - eletronegatividade

ω - índice de eletrofilicidade

S - suavidade química

μ - potencial químico

k - número de níveis da estrutura

n - quantidade de unidade de repetição Si-C

D - diâmetro

D_m - Diâmetro médio

L - comprimento do nanotubo

eV - elétron-volt

Å - angstrom

SUMÁRIO

1. Introdução.....	15
2. Revisão Bibliográfica.....	17
2.1 O cenário da pandemia.....	17
2.2 Os materiais que já são usados como virucida.....	17
2.3 Nanotubos.....	19
2.4 Nanotubos de Carbetto de Silício	20
2.4 Funcionalização de Superfície.....	21
3. Objetivos.....	23
3.1 Objetivo Geral.....	23
3.2 Objetivos Específicos.....	23
4. Materiais e Métodos.....	24
4.1 Construção do nanotubo.....	25
4.2 Cálculos teóricos.....	26
4.3 Docking Molecular.....	29
5. Resultados e Discussão.....	31
5.1 Análises das Propriedades Estruturais e Eletrônicas do Nanotubo.....	31
5.2 Análise das Propriedades Estruturais e Eletrônicas da água e do oxigênio em relação ao nanotubo.....	38
5.3 Análise dos descritores moleculares da água e do oxigênio em relação ao nanotubo.....	40
5.4 Interação com as moléculas de H_2O e 3O_2	42
5.5 Docking Molecular com SiCNT PURO, SiCNT-OH-H, SiCNT- O_2 e SiCNT- O_2H-OH	47
6. Conclusão	54
7. Referências.....	55
8. Anexos.....	63
9. Apêndice.....	70

1. INTRODUÇÃO

Em 2020, a pandemia da síndrome respiratória aguda grave coronavírus 2 SARS-Cov-2 foi oficialmente declarada em março daquele ano. Desde então, esforços para, de alguma maneira, desativar o agente infectante desse mal tem sido o assunto de pesquisas nas mais variadas áreas (PAGANI, Isabel et al, 2023).

Estudos sobre os sintomas apresentados pela doença são importantes para se traçar um caminho para o seu combate, nessa linha de pensamento segundo fonte de publicação de fevereiro de 2020, o sintoma mais apresentado por pacientes com o novo coronavírus foi a febre que se manifestou em 87,9% dos pacientes. A tosse foi observada em 67,7% dos infectados e sintomas com menor frequência foram diarreia manifestada por 3,7% e vômito, sintoma de 5,0% de quem se contaminou. (GUAN, Wei-jie et al, 2020).

Após a determinação dos sintomas, o desafio que se apresentou é a indicação de um tratamento que fosse eficaz contra os sintomas e que tornassem o vírus sem ação, Nada A. Ashour publicou um artigo revisando a tentativa de se utilizar drogas já conhecidas no combate a outros vírus, no intuito de conseguir uma resposta viável de combate ao SARS-CoV-2 (ASHOUR, Nada A. et al, 2023). Entre as várias drogas testadas pode-se citar o Lopinavir, utilizado originalmente no tratamento do vírus HIV e que está sendo testado para a inibição da protease do SARS- CoV-2 (CHU, C. M. et al, 2004), nessa mesma linha de testes existem várias outras drogas sendo testadas, como por exemplo o Remdesivir (MARTINEZ, Miguel Angel, 2020), o Favipiravir (JEAN, Shio-Shinet al, 2020) e o Nafamostatato mesilato (UNO, Yoshiharu, 2020).

Além de tratamentos com drogas, opções como a utilização de materiais para a ação de detectar o vírus, para a desativação do SARS-CoV-2 por meio de superfícies e máscaras também são utilizadas, como, por exemplo: 1) Máscaras com filtro de polipropileno (JUNG, Sunghoon et al.), 2) Biossensores eletroquímicos (BISHT, Ayushi et al.), 3) Compostos de PVC – SiO₂ – Ag (ASSIS, Marcelo et al.) e o nanotubo de carbono (CNT) .

O CNT é formado por tubos cilíndricos de uma ou mais camadas de folhas de grafeno com estrutura hexagonal. Este composto recebe grande atenção devido às suas propriedades físicas e químicas como diâmetro, comprimento, catálise residual, estrutura eletrônica, fator de dispersão e outros. Citando suas utilizações, é possível indicar o uso de nanomateriais de carbono como bactericidas pela geração de espécies reativas de oxigênio (ERO) e a aplicação como virucida a partir da funcionalização de sua superfície (RAJABATHAR, Jothi Ramalingam et al, 2020).

Estudado como opção para o CNT, o nanotubo de carbeto de Silício (SiCNT), tem sua utilização atrelada às circunstâncias onde o nanotubo de carbono apresenta menos vantagens. Um exemplo dessa ideia se encontra no estudo de BAILDYA, Nabajyoti et al., que propõe um melhor revestimento de drogas na utilização do SiCNT em vez do CNT (BAILDYA, Nabajyoti et al. 2023).

A determinação das características geométricas e propriedades moleculares do SiCNT auxiliam na validação desse composto como material promissor no combate do SARS-CoV-2, como um potencial virucida pela capacidade de gerar espécies que possam desativar a proteína do vírus.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 - O CENÁRIO DA PANDEMIA.

O SARS-CoV-2 teve suas primeiras infecções datadas no mês de dezembro no ano de 2019. Existe uma incoerência com essa data pois, oficialmente, o primeiro caso da doença foi registrado em janeiro de 2020. Em qualquer uma das datas o local de origem da pandemia foi Wuhan na província de Hubei na China. Um motivo para a diferença nas datas seria a incapacidade de identificar com precisão o COVID-19 por parte das autoridades de saúde da China (YU, Xiang, *et al.* 2020).

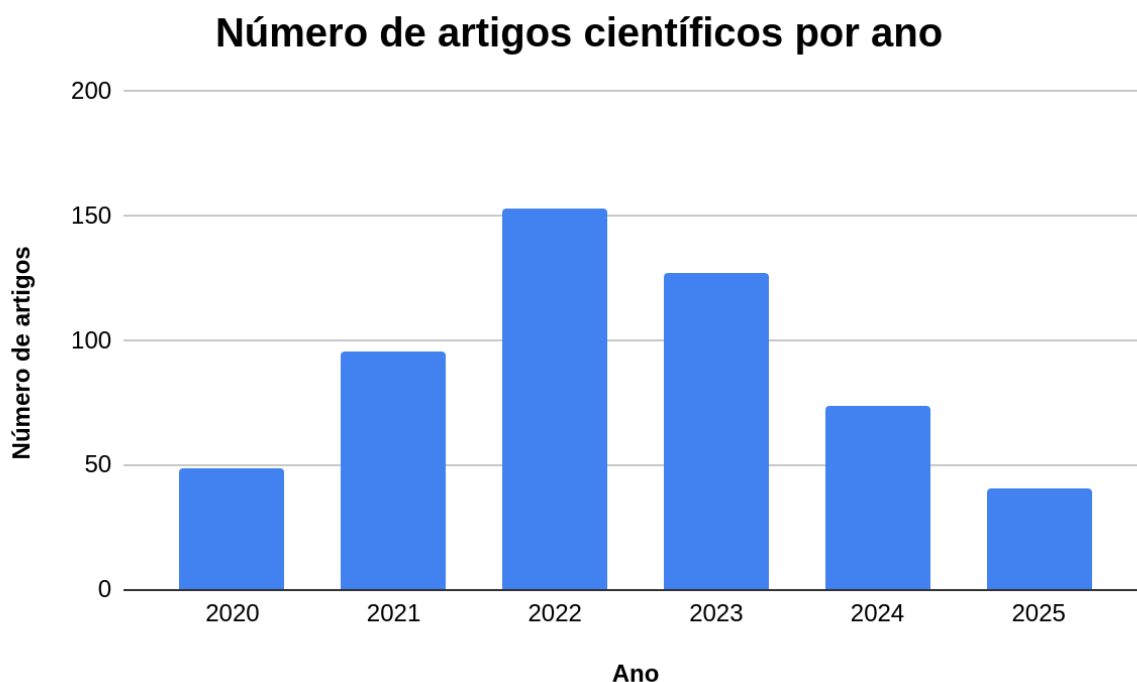
MACHHI, Jatin et al, 2020, indica o início do surto de uma pneumonia, que em 7 de janeiro de 2020 foi declarada como um novo coronavírus. Já no dia 13 de janeiro foi identificado na Tailândia o primeiro caso fora da China, ao final do mês de janeiro mais de 7818 casos foram reportados em 18 países diferentes, com 170 mortes registradas somente na China. No mês de fevereiro países como Egito e França registraram mortes por COVID-19 e ao final daquele mês, mais 11 países europeus registraram casos da infecção. Em 11 de março de 2020 foi declarada pandemia global pelas autoridades e governos ao redor do mundo começaram a impor restrições de lockdowns.

Em abril de 2025 foram contabilizados 777.691.501 casos confirmados da doença com 7.093.267 mortes, essas informações constam no sítio da organização mundial da saúde (<https://data.who.int/dashboards/covid19/cases?n=c>) que foi acessado em 21 de abril de 2025 às 09:56 horas.

2.2 - OS MATERIAIS QUE JÁ SÃO USADOS COMO VIRUCIDA.

Com o avanço dos números de casos/contaminação fez-se necessário a busca por ferramentas capazes de minimizar os números de contaminados e por consequência diminuir o número de óbitos. A figura 2.1 apresenta o número de trabalhos publicados no banco de dados do periódico capes com as seguintes palavras chaves 'Sars-CoV-2 AND Virucidal'

Figura 2.1 - 'Número de artigos científicos por ano' Fonte: CAPES/Periódicos, obtido em https://www.periodicos.capes.gov.br/index.php/acervo/buscaador.html?q=Sars-CoV-2+AND+Virucidal+&source=&publishyear_min%5B%5D=2024&publishyear_max%5B%5D=2025, dia 21-04-2025 às 10:32.



A identificação do vírus se torna imprescindível no combate à pandemia, por isso trabalhos no sentido de melhorar as técnicas e descobrir novas substâncias que auxiliam no diagnóstico da doença são de grande importância neste contexto. CHIU, Chan-Wen et al, 2022, propõe em seu trabalho a utilização de transistor de efeito de campo de semiconductor de óxido de metal (MOSFET) em tiras de glicose funcionalizadas com anticorpos, o resultado esperado é otimizar o trabalho de diagnóstico do SARS-CoV-2, tornando o processo mais rápido que o atual método do teste de reação em cadeia da polimerase (PCR). Já TALEBIAN, Sepehr et al. 2020, indicam em seu trabalho a utilização de ensaio colorimétrico como um teste com maior especificidade para Covid e com um tempo de resposta de 10 min.

No sentido de controlar a disseminação do vírus, uma ferramenta indispensável tem sido a utilização da máscara de proteção individual. Alguns trabalhos, com o objetivo de melhorar a efetividade da prevenção da contaminação e

impedir a proliferação, têm buscado otimizar o poder virucida das máscaras de proteção individual. FOFFA, Ilenia et al, 2022. discutem em seu artigo a utilização de uma camada de nanopartículas a base de cobre em máscaras faciais para eliminação do SARS-CoV-2. JUNG, Sunghoon et al, 2021. discutem em seu trabalho, a utilização de uma camada de cobre em filtro de polipropileno utilizado em máscara facial com potencial de impedir a inalação do vírus. DE MAIO, Flavio et al, 2021. discutem em seu estudo, a utilização de grafeno e de óxido de grafeno em máscaras de proteção com a intenção de inibir a ação infecciosa do SARS-CoV-2.

RODRIGUES, A. M. et al, 2021, testaram a capacidade de encapsulamento da molécula do spilanthol pelos nanotubos de carbeto de silício (SiCNT) e nitreto de boro (BNNT), no transporte e liberação de medicamento no organismo, os nanotubos são utilizados para melhorar a eficácia e a precisão do tratamento. Os nanotubos de carbono (CNT) foram estudados como possíveis virucidas no combate ao vírus HIV apresentando uma afinidade do nanomaterial com a proteína do vírus (NAVANIETHA KRISHNARAJ, R. et al, 2014).

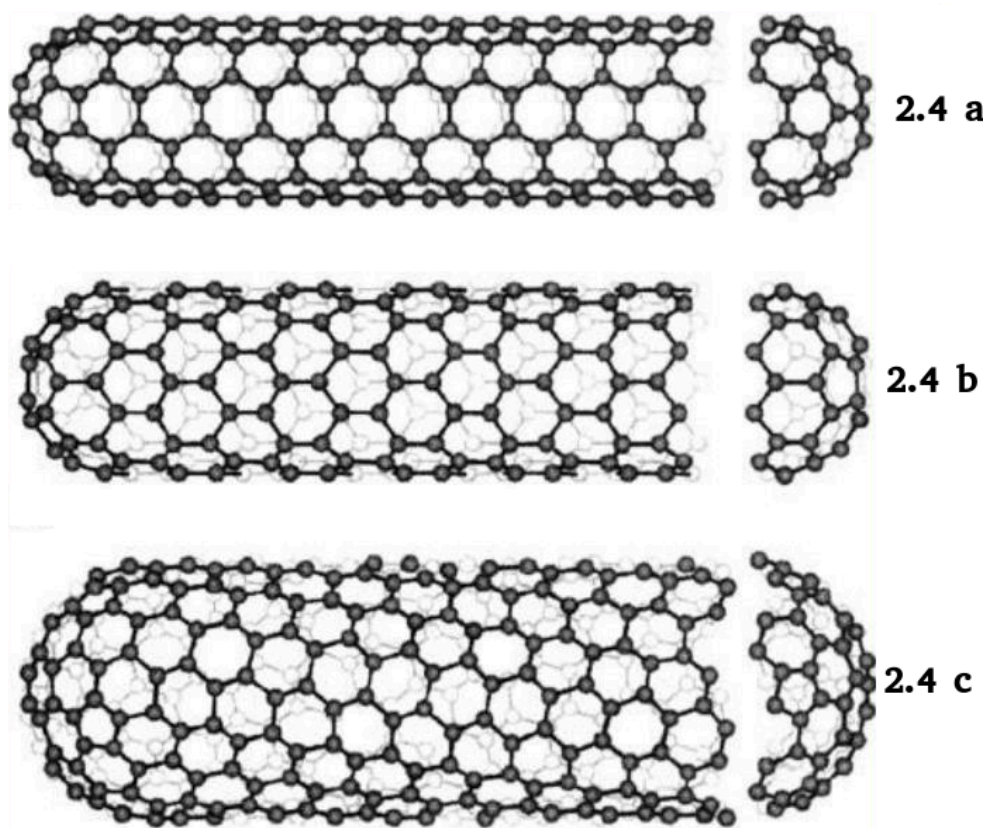
2.3 - NANOTUBOS.

Nanotubos (NT) são cilindros de átomos em escala nanométrica que podem ser usados para uma ampla variedade de propósitos por causa de suas propriedades elétricas ou mecânicas. Diferentes propriedades como o módulo de Yong, resistência à tração, temperatura de degradação, condutividade elétrica, etc são alteradas quando comparadas com dimensões macroscópicas. (MITTAL, Vikas, 2014).

Uma das variações dos compostos em nanoescala é o nanotubo de carbono (CNT), MENON, Madhu et al, 2004, definem o nanotubo de carbono como uma folha de grafeno enrolada. Seguindo a ideia do grafeno como base HARRIS, Peter JF, 2004, indica que esse composto tem uma relação íntima com o fullereno, que é um composto feito do grafeno. A figura 2.2 ilustra cortes feitos no C60 que vão resultar em três variações do nanotubo de carbono. A figura 2.2a ilustra a obtenção do nanotubo do tipo armchair (cadeira em tradução livre) pelo corte no sentido de átomos paralelos no arranjo hexagonal de carbono. Quando o corte é proposto no sentido de átomos das pontas do hexágono obtém-se o nanotubo do tipo zigzag

figura 2.2b e se o corte do C60 seguir sentidos helicoidais do composto obtém-se o nanotubo do tipo quiral figura 2.2c. (HARRIS, Peter JF, 2004)

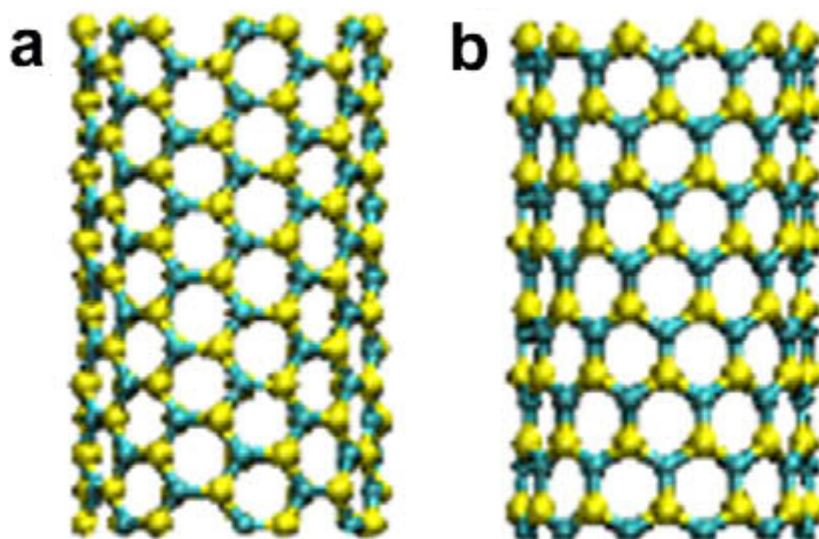
Figura 2.4 - Variações dos nanotubos de carbono (Fonte: HARRIS, Peter JF. Carbon nanotube composites. International materials reviews, 2004)



2.3.1 – NANOTUBOS DE CARBETO DE SILÍCIO.

Variação dos CNT, os nanotubos de carbeto de silício (SiCNT) figura 2.4 a e b onde os átomos de carbono são representados pela cor verde e os de silício pela cor amarela, são moléculas semicondutoras, band gap por volta 1,299 eV (HUANG, S.-P. et al, 2007) para o nanotubo zigzag (8,0) figura 2.5b, por exemplo. Outro SiCNT que podemos citar é o tipo armchair figura 2.5a. Esses materiais apresentam características como inércia química, resistência à oxidação entre outras propriedades, com valores mais interessantes que sua versão que possui somente carbonos.(SETOODEH, A. R. et al, 2009; KELLER, Nicolas et al, 2003).

Figura 2.3 - Nanotubo de carbeto de silício: a - arranjo do tipo armchair; b - arranjo do tipo zigzag. (Fonte: SETOODEH, A. R.; JAHANSHAHI, M.; ATTARIANI, Hamed. Atomistic simulations of the buckling behavior of perfect and defective silicon carbide nanotubes. Computational materials science, 2009)



2.4 FUNCIONALIZAÇÃO DE SUPERFÍCIES

O processo de introduzir, deliberadamente, grupos de compostos em superfícies de materiais é conhecido, de forma geral, como funcionalização de superfícies. Essa técnica tem sido utilizada em vários casos, onde se deseja a modificação superficial com intenções de promover certas interações, visando que as propriedades obtidas na funcionalização produzam resultados específicos que não acontecem com os compostos sem alteração. Desenvolvimento de materiais biocompatíveis, sensores ópticos e dispositivos de detecção química são alguns dos campos de aplicação desta técnica (BARATON, MARIE-ISABELLE, 2015).

Em uma outra abordagem a funcionalização de superfície pode atuar como intermediária de ancoragens de catalisadores e outras moléculas bioativas. Pode-se neste contexto observar duas regiões quimicamente distintas: uma onde acontece a ancoragem (superfície funcionalizada) e a outra o grupo funcional formado pela interação (BARATON, MARIE-ISABELLE, 2015).

A adsorção de certos grupos feita por um semicondutor vai se enquadrar na funcionalização. Como exemplo podemos indicar a adsorção de água e posterior formação de O-H na superfície de um semicondutor como o SiCNT (CHIGO ANOTA, E. et al, 2014). Outro exemplo da adsorção de uma substância por esse semicondutor é a interação do O₂ com a superfície do SiCNT e uma alteração nas propriedades do semicondutor o que muda sua reatividade e pode ser aproveitada em vários contextos (CAO, Fenglei et al, 2010).

3. OBJETIVOS

3.1 OBJETIVO GERAL

Com a utilização dos métodos semi empírico, Hartree-Fock, DFT e de Docking molecular, esse trabalho tem a intenção de analisar a interação dos SiCNT tipo zigzag (8,0) com moléculas de H_2O e O_2 e posteriormente a formação de ERO e interação com a proteína do SARS.

3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1) Com a utilização de programas com linguagem Shell Bash e AWK, obter modelos de nanotubos de Carbetto de Silício por meio da geometria de planos de Grafeno.

2) Calcular a estabilidade do modelo construído e analisar os parâmetros estruturais como distância de ligação, diâmetro e comprimento, além do band gap da estrutura e dos descritores moleculares como dureza global (η) eletronegatividade (χ), índice de eletrofilicidade (ω), suavidade química (S) e potencial químico (μ)

3) Analisar a interação do modelo com H_2O e O_2 e a formação de grupo funcionalizado

4) Analisar a interação do composto funcionalizado com a proteína do SARS-CoV-2.

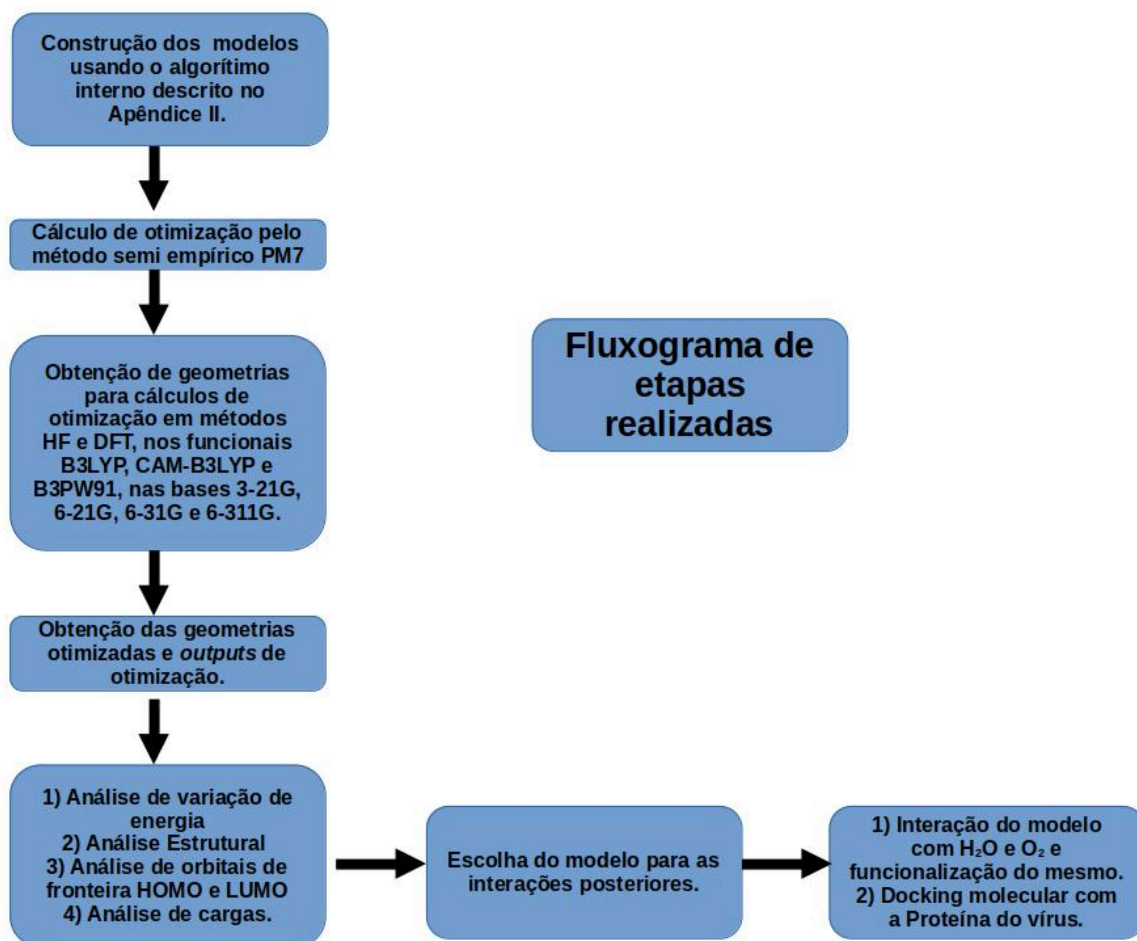
4. MATERIAIS E MÉTODOS

O estudo foi conduzido em três etapas principais: (1) construção e otimização dos modelos, (2) análise da interação do nanotubo com a água e investigação da interação do nanotubo com o oxigênio (3) Docking molecular do modelo funcionalizado com a proteína do SARS-CoV-2. Todas as etapas foram realizadas em ambiente Linux, com o desenvolvimento de algoritmos nas linguagens de programação *Shell Bash* e *AWK*. Esses algoritmos foram projetados tanto para facilitar a construção dos modelos quanto para otimizar a análise dos resultados obtidos por meio de cálculos semi empíricos e *ab initio*. Detalhes sobre alguns dos algoritmos utilizados podem ser encontrados no Apêndice II.

Para os cálculos semi empíricos, foi utilizado o pacote MOPAC 2016, executado em um computador LENOVO com processador Intel Core i3 e 4 GB de RAM. Já os cálculos no nível DFT (Teoria do Funcional da Densidade) e HF (Hartree-Fock) foram realizados no núcleo de computação de alto desempenho da Universidade Estadual de Goiás, utilizando uma máquina modelo *Server HP BL460c Gen9*, equipada com 279,37 GB de RAM, empregando o pacote *Gaussian09*.

A figura 4.1 apresenta uma visão geral das atividades realizadas em cada uma das etapas já mencionadas.

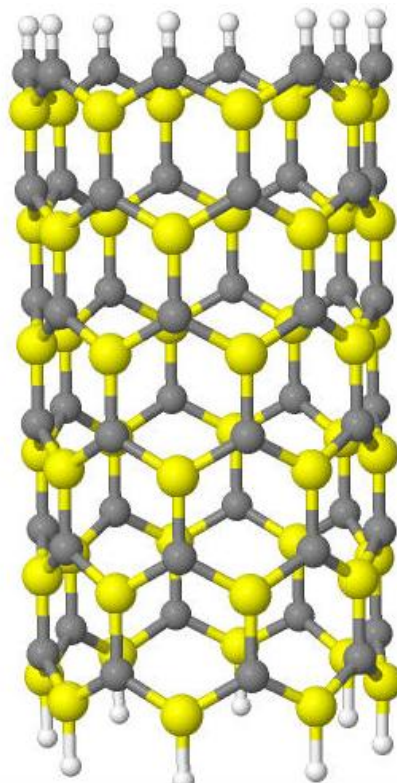
Figura 4.1: Fluxograma das etapas realizadas



4.1 - CONSTRUÇÃO DO NANOTUBO

Existem várias conformações do nanotubo de carbeto de silício e em discussão determinou-se modelo do tipo zig-zag (8,0), com 6 níveis estruturais (fig. 4.2), como objeto de estudo deste trabalho para os cálculos que se seguiram. Para minimizar os efeitos de extremidade, foram adicionados átomos de hidrogênio nas extremidades, garantindo a saturação das valências livres. O modelo de nanotubo apresenta 48 átomos de Si e 48 átomos de C. Para se calcular a quantidade de átomos nas estruturas sem H, usa-se a equação 4.1. Após a otimização estrutural, o modelo foi submetido a estudos de interação com moléculas de água e oxigênio.

Figura 4.2 Nanotubo de Carbetto de Silício (Fonte: Própria)



$$nat = 2 \cdot k \cdot n$$

4.1

Sendo que “*nat*” é a quantidade de átomos por estrutura não saturada, “*k*” é o número de níveis da estrutura e “*n*” é a quantidade de unidade de repetição Si-C.

4.2 CÁLCULOS TEÓRICOS

Os *inputs* desenvolvidos passaram por um processo de otimização, permitindo a análise de propriedades como variação de energia, distribuição de cargas, características dos orbitais HOMO e LUMO, além do cálculo do diâmetro e comprimento das estruturas

4.2.1 OTIMIZAÇÃO DAS ESTRUTURAS

A primeira etapa de otimização das estruturas foi realizada utilizando o método semi empírico PM7, conforme descrito no Anexo I, implementado no pacote computacional MOPAC2016. Esse processo envolveu a otimização das distâncias

de ligação, ângulos de ligação e ângulos de torção. Durante a otimização, o software buscou a configuração de menor energia com base nas *keywords* fornecidas e nas limitações inerentes ao método.

As coordenadas otimizadas foram então extraídas e utilizadas na preparação dos *inputs* para o software GAUSSIAN09, por meio do qual foram realizados cálculos adicionais de otimização em nível DFT/B3LYP, CAM-B3LYP e B3PW91.

4.2.2 OTIMIZAÇÃO DAS ESTRUTURAS - PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS

As propriedades geométricas, como distância de ligação, diâmetro e comprimento do nanotubo, foram obtidas a partir das coordenadas da estrutura otimizada. Para este estudo, foi considerada a distância média de ligação entre os átomos diretamente conectados. Como os modelos de nanotubos foram definidos em coordenadas cartesianas, a distância entre dois átomos foi calculada utilizando o módulo do vetor que os conecta, de acordo com a equação 4.2:

$$d_{Si-C} = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad 4.2$$

Para o cálculo do diâmetro foi considerado a distância entre átomos em posição opostas na estrutura conforme a equação 4.3. Após a coleta dos diâmetros, foi realizada uma média simples, para se obter o diâmetro médio, conforme a equação 4.4.

$$D = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad 4.3$$

$$D_m = \frac{\sum D_i}{n} \quad 4.4$$

O comprimento do nanotubo foi determinado reorganizando os valores das coordenadas z dos átomos. Assim, o comprimento (L) dos nanotubos foi calculado como a diferença entre o $Z_{\text{máx}}$ e o $Z_{\text{mín}}$, conforme descrito na equação 4.5

$$L = Z_{\text{máx}} - Z_{\text{mín}} \quad 4.5$$

4.2.3 |HOMO - LUMO|

A energia de gap, ou simplesmente gap, foi definida neste trabalho como o módulo da diferença entre a energia do orbital molecular ocupado de maior energia (HOMO - Highest Occupied Molecular Orbital) e a do orbital molecular desocupado de menor energia (LUMO - Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Esse valor foi calculado utilizando a equação 4.6 (BROCKS, G., et al, 1996).

$$\text{gap} = |\text{HOMO} - \text{LUMO}| \quad 4.6$$

4.2.4 DESCRITORES MOLECULARES

Aqui, as energias obtidas do orbital molecular ocupado de maior energia (E_{HOMO}) e do orbital molecular desocupado de menor energia (E_{LUMO}) foram utilizadas como parâmetros para os descritores moleculares quânticos, os quais estão diretamente relacionados à energia de ionização (EI) (PICKUP, B. T., et al) e à afinidade eletrônica (AE) (RIENSTRA-KIRACOFÉ, Jonathan C. et al).

$$EI = -E_{\text{HOMO}} \quad 4.7$$

$$AE = -E_{\text{LUMO}} \quad 4.8$$

Além disso, descritores moleculares quânticos (ver anexo II), como dureza global (η) (PEARSON, Ralph G), eletronegatividade (χ) (PEARSON, Ralph G), índice de eletrofilicidade (ω) (PAL, Ranita, et al), suavidade química (S) (NALEWAJSKI,

Roman F. et al,) e potencial químico (μ) (PEARSON, Ralph G), podem ser utilizados para compreender melhor as interações, conforme as Equações (4.9 – 4.13), respectivamente.

$$\eta = \frac{E_g}{2} \quad 4.9$$

$$\chi = \frac{I+A}{2} = -\mu \quad 4.10$$

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad 4.11$$

$$S = \frac{1}{\eta} \quad 4.12$$

$$\mu = \frac{(E_{HOMO} + E_{LUMO})}{2} = -\chi \quad 4.13$$

4.3 - DOCKING MOLECULAR

A estrutura da proteína Spike (S), isolada do SARS-CoV-2, 6VXX em complexo com a proteína ACE2 foi obtida do Protein Data Bank (PDB) (WALLS, Alexandra C. et al. 2020). O programa AutoDockTools (MORRIS, Garrett M. et al, 2009), foi utilizado para preparar as moléculas da proteína e do modelo para o processo de docking (ver anexo I), nesse mesmo software foram determinados os pontos de ancoragem com um grid de busca definido com center_x = 91,411; center_y = 112,34; center_z = 67,081 e dimensões size_x = 72, size_y = 86, size_z = 54. As imagens 3D foram geradas no software Pymol (DELANO, Warren L, 2004)

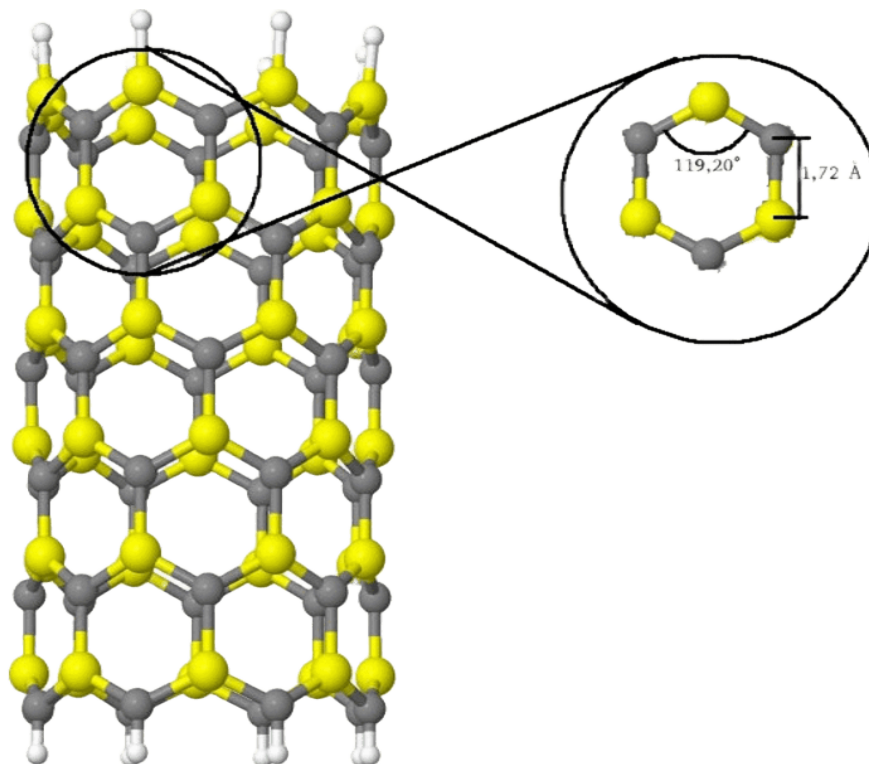
e posteriormente o programas LigPlot (WALLACE, Andrew C, et al, 1995) e gMOLDEN foram utilizados para visualização e análise dos dados obtidos com o docking.

5.RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 - ANÁLISE DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO NANOTUBO

Uma discussão importante a se fazer é sobre o comportamento das propriedades geométricas do modelo (diâmetro, comprimento e ângulo de ligação Si-C) com relação ao método (HF e DFT), Funcionais Híbridos (DFT/B3LYP, DFT/CAM-B3LYP e DFT/B3PW91) e conjuntos de bases (3-21G, 6-21G, 6-31G e 6-311G). O modelo otimizado de nanotubo com fórmula $\text{Si}_{48}\text{C}_{48}\text{H}_{16}$, tipo zigzag (8,0) com o diâmetro, comprimento e ângulo de ligação Si-C é apresentado na figura 5.1. A análise dos descritores geométricos e de valores de energias dos orbitais de fronteira ajudou a determinar um método de cálculo para realizar as interações entre modelo e substâncias como H_2O e O_2 , os valores apresentados pelos dois métodos foram próximos e dois dados ajudaram na escolha do método a ser utilizado, o *band gap* e o diâmetro do nanotubo, o método escolhido foi o HF na base 6-311G.

Figura 5.1 Nanotubo de Carbetto de Silício com indicação da média do comprimento de ligação e da média do ângulo de ligação (Fonte: Própria)



Alguns valores obtidos de diâmetro do SiCNT são 8,14 Å para o método DFT/CAM-B3LYP/6-311G, 8,15 Å para o método DFT/B3LYP 6-311G e DFT/CAM-B3LYP/6-31G, 8,41 Å para o método HF/6-21G e 8,30 Å para o método HF/6-311G, Zhao *et al* 2009, indica em seu artigo uma previsão dos diâmetros esperados para nanotubos do tipo zig zag em algumas configurações (n,0) diferentes, usando o método computacional DFT. Para o nanotubo (8,0) Zhao et all 2009., indica um valor de diâmetro de 8,11 Å que é um valor que apresenta uma consistência com os valores apresentados para o modelo estudado SiCNT (8,0) com os diferentes métodos.

Analisando os valores de diâmetro obtidos com os cálculo e apresentados na tabela 5.1 e comparou-se com o resultado indicado por Zhao et all 2009. que é 8,11

Å, observou-se uma variação percentual máximo 3,69% para o método HF/6-21G que apresentou um valor de 8,41 Å. Os métodos que mais se aproximaram do valor esperado por Zhao em seu estudo são os definidos por DFT/CAM-B3LYP/6-311G apresentando um diâmetro de 8,14 Å, DFT/B3LYP 6-311G e DFT/CAM-B3LYP/6-31G apresentando um diâmetro de 8,15 Å.

Tendo em vista a maior reatividade de nanotubos de menor diâmetros e considerando os modelos que foram propostos para estudo, justifica-se a escolha do modelo (8,0) para esse trabalho, visto que para produção de espécies reativas de oxigênio é necessário que a molécula tenha uma superfície reativa capaz de atuar como doadora e/ou receptora de elétrons.

É necessário observar que o método da DFT é considerado falho para discussão de valores de *band gap* pois existem inconsistências que este método de aproximação pode apresentar. PERDEW, John P. 1986. discute em seu artigo que existe uma descontinuidade nas derivadas de energia, que levam a valores de *gap* que se afastam dos valores esperados para o modelo. Para encontrar os valores reais de *gap* é necessário somar ao *gap* da estrutura de Kohn-Sham mais uma constante finita C, valor esse que é previsto na correção da inconsistência dos gaps.

Apesar de o método da DFT apresentar essa descontinuidade, ele continua sendo utilizado, visto que, a tendência que o mesmo assume, crescente ou decrescente à depender da interação é correta, portanto, continua sendo de grande valia na discussão da viabilidade de uma reação proposta, pois como já observado a reatividade química de um composto pode ser observada pelo *gap* que os orbitais HOMO e LUMO apresentam.(KARELSON, Mati, *et al*, 1996)

O *band gap* pode ser obtido por diferentes técnicas experimentais como por exemplo, espectro de absorção óptica MAKUŁA, Patrycja *et al*, 2018., reflectância foto modulada (PR) WU, J. *et al*, 2003, Espectros de fotoluminescência (PL). TONY, Voo Chung Sung *et al*, 2017, apresenta um valor de 2,67 eV para o *gap* do SiCNT. Uma vez que a DFT subestima e o método HF superestima os valores de *band gap*, decide-se portanto adotar esse valor experimental como referência.

A tabela 5.2 apresenta os valores de *band gap* obtidos nos cálculos feitos em situações distintas de métodos, bases e funcionais híbridos.

A escolha do método HF-6-311G foi fundamentada na concordância entre o valor teórico do band-gap (2,41 eV) obtido com esse método e o valor experimental encontrado (2,67 eV) o desvio percentual apresentado pelo HF com o valor da literatura de 9,74% o que, para o método foi o menor desvio de valor. A proximidade desses valores indica que o HF-6-311G é capaz de capturar de maneira precisa as características eletrônicas do sistema em estudo, especialmente no que diz respeito à descrição da separação entre os orbitais HOMO e LUMO, que é crucial para a definição das propriedades elétricas do material. Além disso, o método HF-6-311G, com seu nível de teoria Hartree-Fock combinado com a base 6-311G, oferece um bom equilíbrio entre precisão e custo computacional, sendo apropriado para o estudo de materiais cujas propriedades eletrônicas dependem fortemente da interação entre elétrons. A confiabilidade do valor do band-gap obtido com esse método torna-o adequado para modelar e compreender o comportamento do material em condições experimentais, o que é essencial para uma análise mais detalhada das suas aplicações práticas, como em dispositivos eletrônicos ou fotônicos.

Por outro lado, os valores do band-gap obtidos com cálculos DFT utilizando diferentes funcionais híbridos tendem a subestimar significativamente o valor do gap, apresentando valores que variam entre 0,18 e 0,61 eV. Essa subestimação pode levar à previsão errônea de que o material se comporta como condutor, em vez de semicondutor, como é a característica real do material. Tais discrepâncias podem afetar negativamente a interpretação das propriedades eletrônicas e as aplicações tecnológicas do material, uma vez que a precisão na determinação do band-gap é crucial para compreender seu comportamento em dispositivos semicondutores.

Portanto, a escolha do método HF-6-311G, com sua maior precisão na descrição do band-gap, assegura que as simulações estejam mais alinhadas com os dados experimentais e com as propriedades esperadas do material em questão, garantindo uma análise mais acurada e relevante para as futuras aplicações. Além disso, a otimização geométrica realizada por esse método também se mostrou eficiente, pois o comprimento de ligação Si-C calculado de 1,72 Å, está em estreita concordância com o valor de 1,78 Å (Zhao et al, 2009.), com uma diferença de 0,06 Å. Isso reforça a confiabilidade do método, não apenas na previsão das propriedades eletrônicas, mas também na descrição próxima da precisão das

características estruturais do material, o que é estimulante para a proposta de futuras aplicações tecnológicas.

Tabela 5.1 - Comparação das 1-médias de comprimento de Ligação (Å), 2-Ângulos de ligação e 3-Ângulos Torção (°), diâmetro (D) e comprimento (C) em (Å), em relação base, métodos e funcionais híbridos

Bases	Métodos																			
	HF					DFT														
						Funcionais Híbridos														
						B3LYP					CAM-B3LYP					B3PW91				
	1	2	3	D	C	1	2	3	D	C	1	2	3	D	C	1	2	3	D	C
3-21G	1,73	119,18	9,63	8,40	16,8	1,74	118,58	8,88	8,22	17,04	1,73	118,73	9,22	8,19	16,91	1,74	118,58	8,94	8,21	17,01
6-21G	1,73	119,16	9,62	8,41	16,87	1,75	118,54	8,76	8,23	17,12	1,74	118,69	9,12	8,20	16,99	1,75	118,55	8,84	8,05	17,09
6-31G	1,73	119,14	9,68	8,35	16,81	1,74	118,55	8,86	8,01	17,04	1,73	118,72	9,27	8,15	16,91	1,73	118,55	8,94	8,16	17,01
6-311G	1,72	119,20	9,71	8,30	16,71	1,73	118,61	7,63	8,15	16,95	1,72	118,81	10,53	8,14	16,81	1,73	118,61	8,96	8,05	16,91

Tabela 5.2 - Comparação dos HOMO, LUMO e *band gap* (eV) em relação a métodos, funcionais híbridos e bases.

Bases	Métodos												<i>band gap</i> *
	HF			DFT									
				Funcionais Híbridos									
	B3LYP			CAM-B3LYP			B3PW91						
	HOMO	LUMO	<i>band gap</i>	HOMO	LUMO	<i>band gap</i>	HOMO	LUMO	<i>band gap</i>	HOMO	LUMO	<i>band gap</i>	
3-21G	-4,06	-1,81	2,25	-3,82	-3,63	0,18	-3,96	-3,36	0,60	-3,96	-3,77	0,18	2,67
6-21G	-4,01	-1,80	2,22	-3,80	-3,62	0,18	-3,94	-3,34	0,60	-3,94	-3,75	0,18	
6-31G	-4,19	-1,89	2,30	-3,90	-3,72	0,18	-4,05	-3,44	0,60	-4,01	-3,82	0,18	
6-311G	-4,37	-1,96	2,41	-4,02	-3,83	0,19	-4,17	-3,56	0,61	-4,11	-3,92	0,19	

* *band gap* experimental.

5.2 - ANÁLISE DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DA ÁGUA E DO OXIGÊNIO EM RELAÇÃO AO NANOTUBO.

A discussão da interação entre o SiCNT, a H_2O e o O_2 pode ser iniciada com a análise das propriedades estruturais da água e do oxigênio. Parâmetros HOMO, LUMO, band gap, ângulo de ligação e comprimento de ligação fornecem informações valiosas para se indicar interações possíveis. A tabela 5.3 indica os valores de parâmetros estruturais da H_2O e do O_2 .

Tabela 5.3 - Comparação dos HOMO, LUMO e band gap (eV) em relação a métodos, funcionais híbridos e bases. Valores de comprimento de ligação e ângulo (Å) da água e oxigênio

Substância	Base	Métodos		
		HF		
		HOMO(eV)	LUMO (eV)	Band gap (eV)
Água	6-311G	-13,64	3,95	17,59
Oxigênio	6-311G	-15,42	11,15	26,57
Substância	Base	Métodos		
		HF		
		Ângulo	Comprimento de ligação (Å)	
Água	6-311G	111,8 °	0,95	
Oxigênio	6-311G	180,0 °	1,20	

A atuação do SiCNT como superfície ativadora da H_2O e do O_2 passa pela observação das características estruturais como band gap, ângulo de ligação e comprimento de ligação. As propriedades do semiconductor vão ditar a possibilidade da funcionalização de sua superfície pela interação com água e oxigênio. A ação como um catalisador e interação com as moléculas é o que é esperado na interação dos três compostos, parâmetros estruturais nos fornecem indicativos dessa ação.

Apresentando um band gap alto no valor de 17,59 eV e um comprimento de ligação O-H de 0,95 Å, a água apresenta uma estrutura rígida, pela forte interação do oxigênio com o hidrogênio. No entanto, o semiconductor pode atuar como catalisador, fornecendo energia suficiente para superar a barreira de energia e promover excitação dos elétrons da banda de valência para a banda de condução. Acontecendo, esse processo possibilita a dissociação da água em O-H e H que posteriormente funcionalizar a superfície do SiCNT, criando um sítio de hidroxila na superfície do semiconductor. Quanto mais eficiente o semiconductor no fornecimento de energia para a H₂O e facilitar a quebra da ligação O-H, melhor será o processo de funcionalização e formação do hidróxido na superfície do SiCNT.

O O₂ apresenta um valor de band gap ainda mais alto com o valor de 26,57 eV, o que indica que sua ativação demanda ainda mais energia que a água. A funcionalização a partir do oxigênio demanda uma quantidade alta de energia e o que se espera é que o SiCNT possa fornecer essa demanda ao oxigênio. Espera-se a adsorção do O₂ molecular na superfície do semiconductor que vai fornecer ao oxigênio elétrons necessários para a ativação do composto com redução do mesmo e consequente formação de superóxidos.

Dessa forma a aptidão do SiCNT de ativar moléculas parte da sua característica de semiconductor que lhe permite agir como um catalisador que vai fornecer a energia necessária ao processo de ativação de água e oxigênio. Seja pela quebra da ligação O-H na água ou a adsorção do oxigênio molecular na sua superfície, o SiCNT atua de forma decisiva na formação de superóxidos e hidroxila por interação com as moléculas de H₂O e O₂. A formação de compostos com água e oxigênio são importantes nas interações com contaminantes como a proteína Spike do SARS-CoV-2.

5.3 - ANÁLISE DOS DESCRITORES MOLECULARES DA ÁGUA E DO OXIGÊNIO EM RELAÇÃO AO NANOTUBO.

Tendo em vista a necessidade de uma resposta confiável de utilização do modelo, faz-se necessário também as predições dos descritores moleculares conforme equações 4.1 - 4.13. sendo encontrado na tabela 5.4.

Tabela 5.4 - Descritores moleculares quânticos obtidos por meio dos parâmetros de reatividade EHOMO e ELUMO utilizando cálculos HF/6-311G.

modelo	EI	AE	μ eV	χ eV	η eV	ω eV	S eV
Água	13,64	-3,95	-4,84	4,84	8,79	1,33	0,11
Oxigênio	15,47	-11,15	-2,13	2,13	13,28	0,17	0,07
SiCNT (8,0)	4,37	1,96	-3,16	3,16	1,20	4,15	0,83

legenda: EI - energia de ionização, AE afinidade eletrônica, μ - potencial químico, χ - eletronegatividade, η - dureza química, ω - eletrofilicidade e S - suavidade química.

O comportamento químico do SiCNT pode ser previsto com a análise de seus descritores moleculares, a compreensão de suas interações com moléculas externas em particular a H₂O e o O₂ no contexto de suas interações em processos catalíticos passam pelos valores de seus descritores. O conhecimento dos descritores moleculares tanto do semicondutor como das moléculas que irão interagir com ele nos fornece a compreensão do comportamento dos elétrons no material e a capacidade do SiCNT de fornecer o que precisam as outras partes que estão em interação com ele.

Começando pela energia necessária para remover um elétron do material, a energia de ionização para o semicondutor é de 4,37 eV, este valor por si só não nos fornece muita informação, mas quando avaliado junto com as energias de ativação da H₂O que é de 13,64 eV e do O₂ que é de 15,47 eV, observamos que o semicondutor, em uma possível interação com essas duas moléculas, vai apresentar a característica de nucleófilo enquanto que água e oxigênio serão eletrófilos. Os valores altos de energia de ativação de H₂O e o O₂, quando comparados com a EI do semicondutor, sugerem que essas duas substâncias têm dificuldade em doar elétrons e uma interação que elas possam vir a fazer depende da existência de um catalisador que viabilize essa interação.

A afinidade eletrônica que mede a capacidade de aceitar elétrons para o semicondutor é de 1,96 eV, comparando com as afinidades de H₂O no valor de -3,95 eV e do O₂ que é de -11,15 eV, observamos uma capacidade maior nas moléculas

que vão interagir com SiCNT, visto que os valores da água e do oxigênio são negativos. Essa comparação de valores entre o semicondutor, a água e o oxigênio indica que o nanotubo vai interagir como um catalisador, fornecendo elétrons na interação e ativando as moléculas em sua superfície. Espera-se que na interação as moléculas de H_2O e O_2 vão ser adsorvidas na superfície do semicondutor e formar o O-H e $\text{O}_2^{\bullet-}$, espécies de interesse nesse estudo.

A tendência geral em atrair ou liberar elétrons por um sistema é indicada pelo potencial químico, esse índice tem valor de -3,16 eV para o SiCNT, -4,84 eV para a H_2O e -2,13 para o O_2 . A observação desse descritor é mais elucidativa quando observamos também a eletronegatividade que é a capacidade de um material de atrair elétrons, para o semicondutor o valor de eletronegatividade é de 3,16 eV, para a água é de 4,84 eV e para o oxigênio o valor apresentado é de 2,13 eV. Observa-se que o potencial do SiCNT é intermediário e indica que uma interação com a água é mais provável, e essa ideia é reforçada pela alta eletronegatividade que a água apresenta, na comparação dos três valores. Pode-se inferir também que o oxigênio com seu menor valor de eletronegatividade terá mais dificuldades de interações indicando uma grande estabilização deste composto.

A resistência de um material às mudanças eletrônicas é medida pela dureza química, esse descritor apresenta valores de 1,20 eV para o SiCNT, 8,79 eV para a H_2O e 13,28 eV para o O_2 , esses valores indicam que água e oxigênio apresentam grande dureza o que pode ser traduzido como uma alta estabilização química, porem o valor de dureza do semicondutor indica que o mesmo tem a capacidade de agir como catalisador de interações com H_2O e O_2 . O valor de baixa dureza do SiCNT lhe confere flexibilidade eletrônica e pode ajudar as interações com as moléculas externas como H_2O e O_2 .

A propensão em aceitar carga eletrônica é medida pelo índice de eletrofilicidade e o semicondutor apresenta um valor de 4,15 eV o mais alto entre as três substâncias, água apresenta um valor de 1,33 eV e o oxigênio tem um valor de 0,17, a análise desses resultados indica que o SiCNT terá uma maior facilidade nas interações de estabilizar os compostos mais eletronegativos e assim ativar as moléculas que vão interagir na superfície do semicondutor.

Pela medida da facilidade em ceder ou aceitar elétrons observamos a suavidade química, o valor de 0,83 eV apresentado pelo semicondutor, é um valor consideravelmente mais alto que o da H_2O que é de 0,11 eV e bem maior que o do

O₂ que é de 0,07 eV. A análise destes valores indica que o SiCNT é considerado suave, enquanto que água e oxigênio são considerados duros, pela teoria HASB observa-se que a interação química prefere acontecer entre espécies que apresentam a mesma classificação, ou seja, substâncias duras reagem com substâncias duras e vice e versa, logo tomando só este parâmetro como devemos esperar uma interação física entre o semicondutor e as moléculas de água e oxigênio.

Em conjunto, os descritores moleculares tanto para a água quanto para o oxigênio indicam que essas moléculas, quando ativadas por um semicondutor, são propensas a interagir com a superfície do semicondutor, e podem desempenhar um papel crucial em reações de oxidação, como a degradação de poluentes e processos de síntese. O semicondutor, com seus descritores moleculares, ao interagir com H₂O e O₂, facilita a quebra de ligações e a formação de espécies ativadas, criando um ambiente favorável para reações de oxidação, com implicações em várias aplicações catalíticas e ambientais.

5.4 INTERAÇÃO COM AS MOLÉCULAS DE H₂O E ³O₂

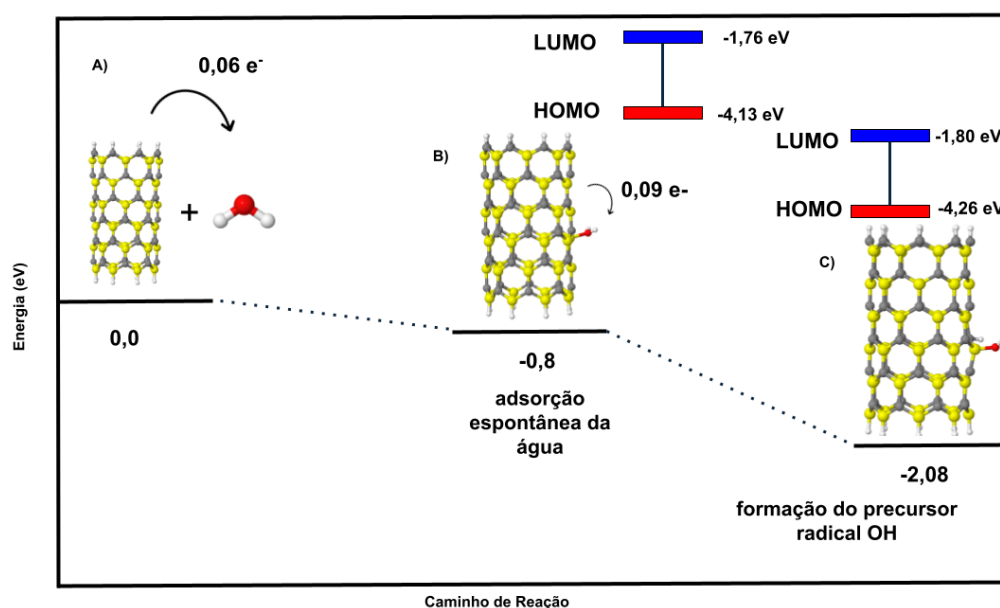
A interação entre superfícies de materiais nanoestruturados como o SiCNT e moléculas simples, como a molécula de H₂O e ³O₂, é de grande interesse tanto para a compreensão dos mecanismos catalíticos quanto para o desenvolvimento de novas aplicações em catálise. Essa seção é dedicada a investigar a interação entre SiCNT e a molécula de água, como também com a molécula de oxigênio, focando na análise da transferência de cargas e nas alterações dos orbitais moleculares durante a adsorção e a subsequente decomposição, a fim de se averiguar a espontânea formação de compostos funcionalizados nessa superfície.

5.4.1 FORMAÇÃO DO PRECURSOR RADICALAR ·OH (HIDROXILA)

A interação inicial entre o SiCNT e a molécula de água ocorre com uma energia favorável de -0,8 eV (ver figura 5.2), evidenciando um processo exotérmico que resulta na formação de um complexo adsorvido. Nesta etapa, a análise dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO) sugere que os orbitais não-ligantes do

oxigênio se sobrepõem aos orbitais disponíveis do SiCNT, promovendo uma transferência parcial de carga. A carga de Mulliken do oxigênio, inicialmente de $-0,81$, é modificada para $-0,87$ após a adsorção, com uma transferência efetiva de cargas de $0,06 e^-$ para a molécula de água, indicando que há um acréscimo de densidade eletrônica no oxigênio.

Figura 5.2 - Interação da água (H_2O), em seus estágios a, b e c, com o SiCNT - Fonte Própria



Posteriormente à adsorção ativa da molécula de água, a quebra da ligação O–H é facilitada. Durante esse processo, a transferência adicional de elétrons para o oxigênio é observada, e a carga de Mulliken alcança $-0,96$, com um acréscimo de $0,09 e^-$ (ver figura 5.2b). A dissociação resulta na formação dos intermediários OH e H na superfície do SiCNT. A maior concentração de carga negativa no oxigênio pós-dissociação indica uma reconfiguração dos orbitais, como apresentado no diagrama energético dos orbitais HOMO e LUMO, com uma elevação energética no HOMO de $0,13$ eV e uma redução energética no LUMO de $0,04$. Essa reconfiguração energética é devido à quebra da ligação O–H, e posteriormente à adsorção do hidrogênio na superfície do material (ver Figura 5.2c), que altera a distribuição eletrônica e estabiliza o grupo OH.

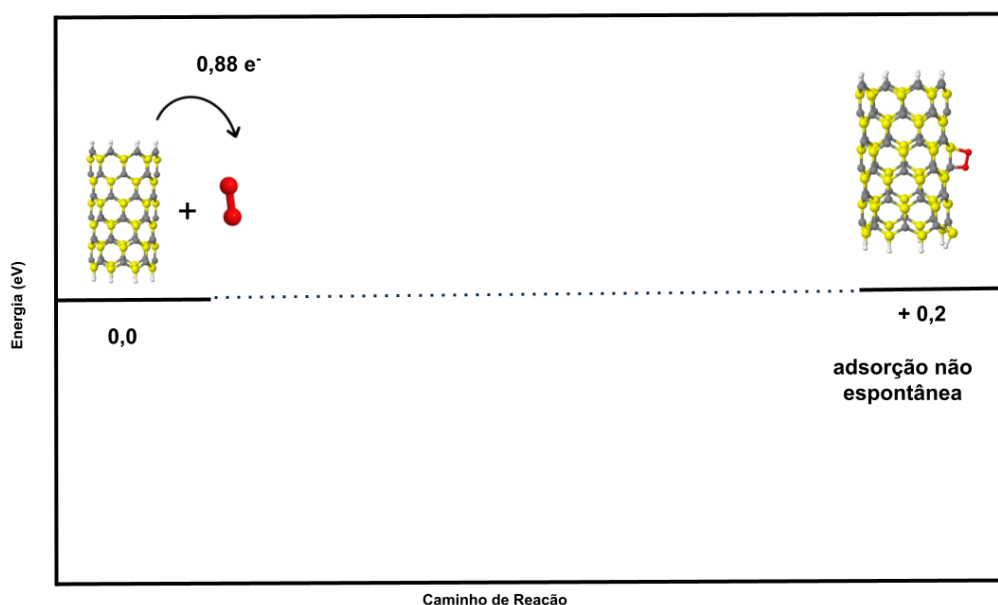
A análise das cargas de Mulliken fornece informações sobre a transferência eletrônica durante o processo. Inicialmente, a carga de $-0,81$ no oxigênio reflete sua

alta eletronegatividade. A adsorção no SiCNT resulta em um incremento da carga para $-0,87$, sugerindo uma transferência de elétrons do substrato para a molécula de água. Este fenômeno é coerente com a Teoria dos Orbitais de Fronteira (FMO), onde a interação entre o HOMO do SiCNT e o LUMO da molécula de água facilita a doação eletrônica, ativando a molécula para a subsequente dissociação.

5.4.2 FORMAÇÃO DO PRECURSOR RADICALAR O_2^-

Para o estudo da formação do precursor O_2^- observa-se a aproximação do oxigênio com a superfície do SiCNT. Embora a energia associada à adsorção seja desfavorável com um valor de $+0,2$ eV (ver figura 5.3), o processo ocorre com uma transferência de carga notável.

Figura 5.3 - Interação do Oxigênio (O_2) com o SiCNT - Fonte Própria



A molécula de oxigênio, em seu estado isolado, apresenta uma distribuição simétrica de carga, com valor resultante de Mulliken igual a 0, refletindo a ausência de polarização interna significativa. Ao interagir com a superfície do SiCNT, ocorre uma sobreposição dos orbitais de fronteira, onde os orbitais ocupados do SiCNT interagem com os orbitais vazios ou parcialmente ocupados da molécula de oxigênio. Essa interação, descrita pela Teoria dos Orbitais de Fronteira (FMO), facilita a doação de elétrons do SiCNT para a molécula de oxigênio. Como resultado,

a carga de Mulliken na molécula evolui de 0 para $-0,88 e^-$, indicando uma polarização induzida.

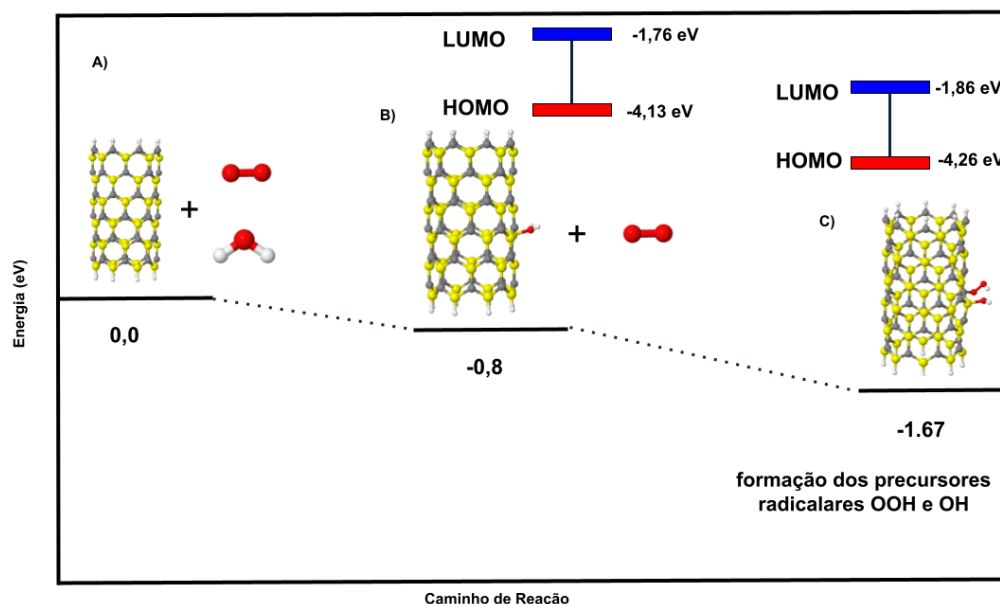
Além de fatores experimentais externos que podem facilitar energeticamente a adsorção da molécula de oxigênio na superfície, reações exotérmicas, como uma interação com água antes da reação com o O_2 podem facilitar o rompimento da barreira energética, fornecendo energia suficiente para que o processo de adsorção ocorra.

5.4.3 FORMAÇÃO DO PRECURSOR RADICALAR O_2H (SUPERÓXIDO) E $\cdot OH$ (HIDROXILA)

Tendo em vista que a barreira energética da adsorção da molécula de oxigênio pode ser superada por meio de uma có-adsorção exotérmica, deve-se avaliar a interação sequencial da molécula de água e posteriormente oxigênio.

Analisando a interação por etapas, a molécula de água aproxima-se da superfície do SiCNT e é adsorvida com uma energia de $-0,8 eV$, como apresentado na figura 5.4. Durante esse processo, os orbitais não-ligantes do oxigênio interagem com os orbitais disponíveis da superfície, promovendo uma transferência parcial de carga que ativa a molécula (ver figura 5.4 A). Esse rearranjo eletrônico prepara o sistema para a etapa seguinte de có-adsorção.

Figura 5.4 - Interação por etapas do modelo de SiCNT com a água (H₂O) e posteriormente com o Oxigênio (O₂) - Fonte Própria



Subsequentemente, a molécula de oxigênio é co-adsorvida na superfície já modificada pela presença da água, com uma energia favorável de $-0,87$ eV. A interação dos orbitais do O₂ com o complexo SiCNT-H₂O resulta em uma redistribuição da densidade eletrônica que favorece a estabilização do sistema. Essa redistribuição de densidade eletrônica é evidenciada pela mudança no diagrama energético dos orbitais de fronteira. Nota-se que a adsorção da molécula de oxigênio tem um efeito proeminente no LUMO quando comparado com a dissociação da molécula de água na superfície, demonstrando que a quebra da molécula de água é a maior responsável pela mudança na região do HOMO e a adsorção da molécula de O₂ é responsável pelas mudanças significativas na região do LUMO. (ver figuras 5.4 B e Figura 5.4 C).

No processo simultâneo de co-adsorção, ocorre uma reorganização dos elementos constituintes dos adsorbatos: I) O oxigênio pertencente à molécula de água, ao interagir com a superfície e com o O₂ adsorvido, sofre uma ativação que

leva à formação de um precursor radicalar OH. Esse grupo exibe uma carga parcial de Mulliken de $-1,01 e^-$, evidenciando uma concentração adicional de densidade

eletrônica que o torna mais reativo. II) Paralelamente, os oxigênios da molécula de O_2 reorganizam-se de forma a constituir o precursor radicalar OOH, com uma densidade de carga parcialmente concentrada de $-0,83 e^-$. Essa modificação na distribuição eletrônica implica na polarização da molécula, contribuindo para a sua ativação.

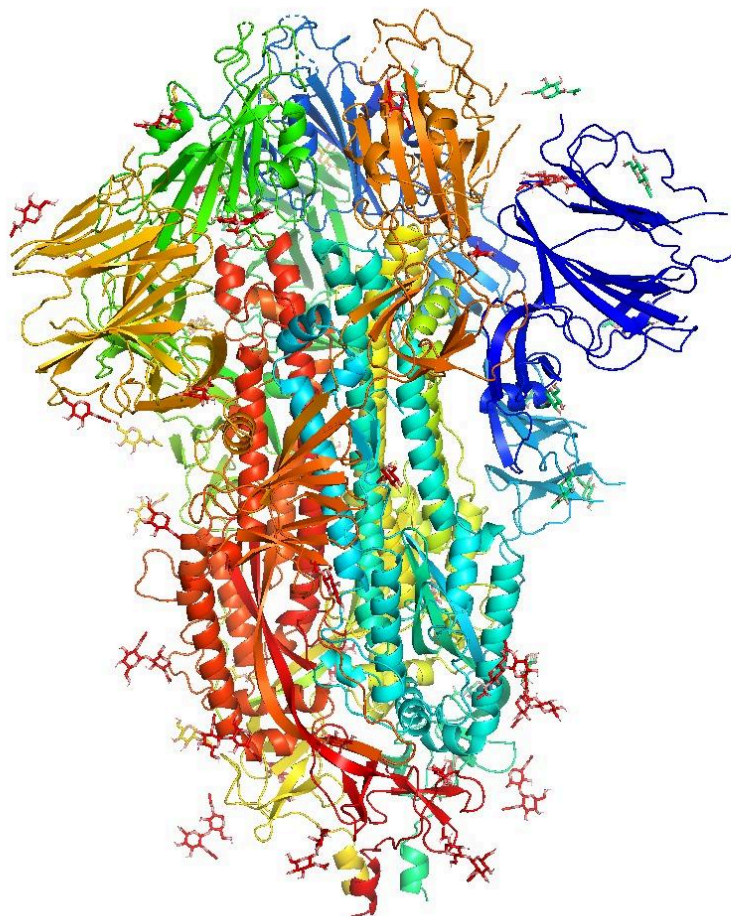
A presença de superfícies funcionalizadas de materiais tem sido amplamente associada à modulação de várias vias bioquímicas, incluindo a inativação de proteínas virais, como a proteína spike do vírus SARS-CoV-2 (ASSIS, Marcelo et al, 2021; MENDONÇA, Pedro Simão Sousa et al, 2023; ASSIS, Marcelo et al, 2024). As superfícies funcionalizadas, como o radical hidroxila ($OH^\bullet$) e o superperóxido (O_2H), são moléculas altamente reativas que podem modificar diretamente as estruturas proteicas, como a spike, por meio de processos de oxidação. Essas modificações nas cadeias peptídicas da proteína spike resultam, frequentemente, na interrupção de suas funções biológicas essenciais, como a capacidade de se ligar ao receptor ACE2 nas células hospedeiras. Ao oxidar componentes-chave da estrutura da proteína, as superfícies funcionalizadas induzem conformações alteradas ou danos irreversíveis que reduzem a eficácia da proteína spike na mediação da entrada viral, consequentemente limitando a infecção viral. Essa interação representa um potencial mecanismo de interferência nas infecções virais, destacando o papel das superfícies funcionalizadas não apenas como agentes de defesa celular, mas também como alvos terapêuticos em estratégias antivirais. Sendo assim, faz-se necessário o estudo da interação dessas superfícies oxidadas com a proteína spike.

5.5 DOCKING MOLECULAR COM SICNT PURO, SICNT-OH-H, SICNT- O_2 E SICNT- O_2 H-OH

A proteína spike (S) do SARS-CoV-2 desempenha um papel crucial na entrada viral nas células hospedeiras, tornando-se um alvo prioritário para estratégias terapêuticas. Nesse contexto, investiga-se a potencial inativação da proteína spike por meio da interação com nanotubos de carbeto de silício (SiCNT), os quais podem ser funcionalizados com diferentes grupos químicos. Aqui avaliou-se, via docking molecular, a interação de quatro modelos de SiCNT com a proteína 6VXX (WALLS, Alexandra C. et al. 2020) (ver figura 5.7), utilizando um grid

de busca definido com $\text{center_x} = 91,411$; $\text{center_y} = 112,34$; $\text{center_z} = 67,081$ e dimensões $\text{size_x} = 72$, $\text{size_y} = 86$, $\text{size_z} = 54$.

Figura 5.5 - Proteína Spike 6VXX do SARS-CoV-2 - Fonte: WALLS, Alexandra C. et al. Structure, function, and antigenicity of the SARS-CoV-2 spike glycoprotein.



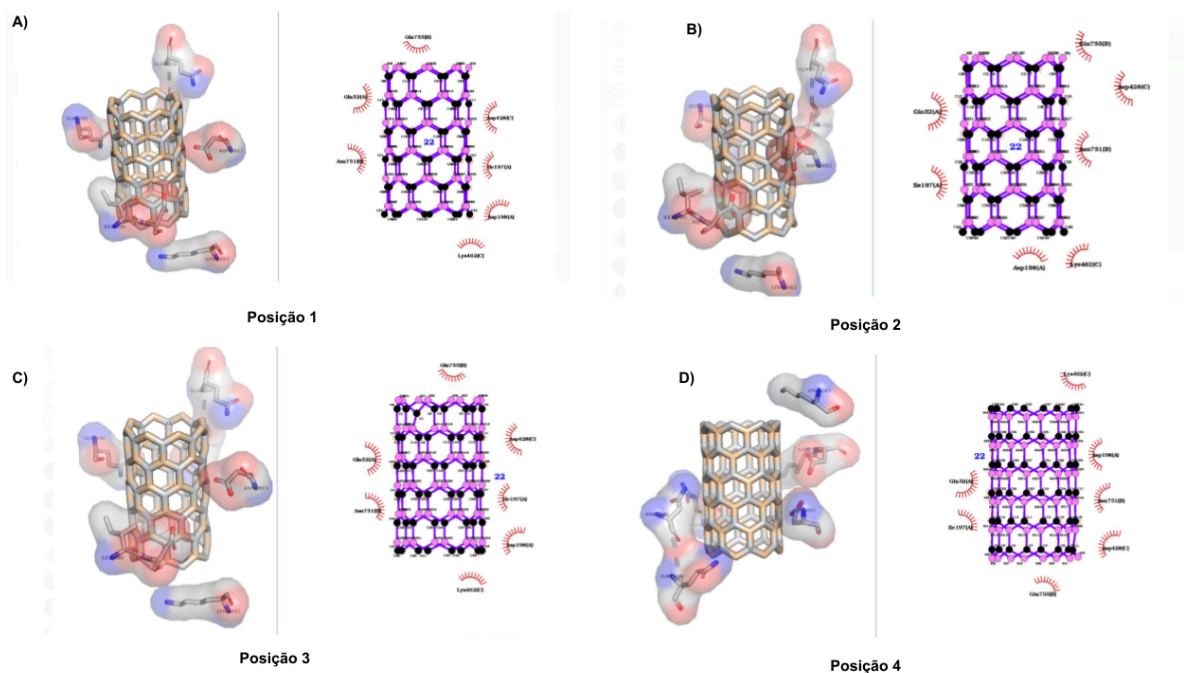
A tabela 5.5 apresenta os 4 primeiros valores energéticos encontrados para cada modelo, como também o valor da afinidade em cada posição.

Tabela 5.5 - Parâmetros de Docking e Interações Moleculares entre os Modelos de SiCNT e a Proteína Spike (PDB: 6VXX), incluindo Energia de Interação.

MODELOS	POSIÇÃO	ENERGIA (KCAL/MOL)	AFINIDADE (RMSD) (Å)
SiCNT PURO	1	-9,11	0,00
	2	-9,10	0,21
	3	-9,08	0,21
	4	-9,08	0,22
SiCNT-OH-H	1	-9,85	0,00
	2	-9,84	37,42
	3	-9,40	1,22
	4	-9,40	37,67
SiCNT-O ₂	1	-10,17	0,00
	2	-10,14	37,46
	3	-10,08	37,36
	4	-10,06	1,61
SiCNT-O ₂ H-OH	1	-10,31	0,00
	2	-10,22	38,00
	3	-10,10	1,57
	4	-10,04	2,44

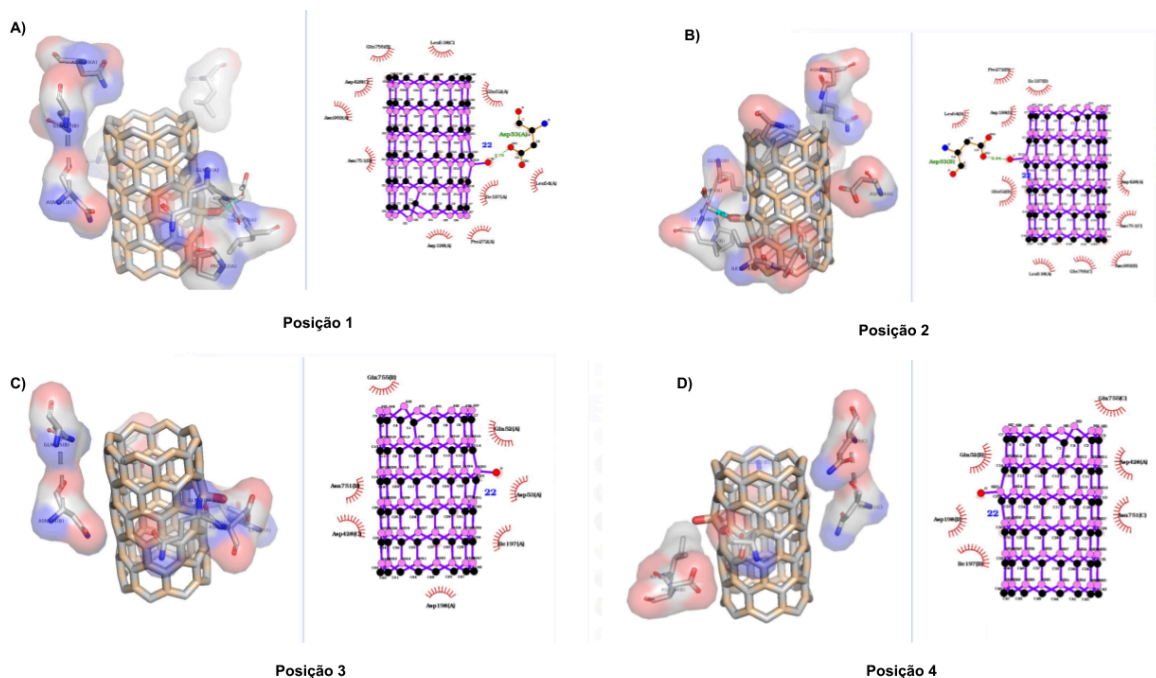
No primeiro modelo, o SiCNT puro apresentou uma energia de interação de -9,11 kcal/mol, com uma afinidade, desvio quadrático médio, RMSD de 0,00 (ver tabela 5.5), indicando uma conformação de ligação estável. As interações estabelecidas foram exclusivamente hidrofóbicas, envolvendo os resíduos (ver tabela 1, anexo III) Gln755(B), Gln52(A), Asn751(B), Lys462(C), Asp198(A) e Ile197(A) (ver figura 5.6). A ausência de ligações de hidrogênio sugere que, apesar da estabilidade relativa, a complexação pode não ser suficientemente robusta para induzir alterações significativas na estrutura da proteína.

Figura 5.6 - Interação do SiCNT puro com a proteína Spike - Fonte própria



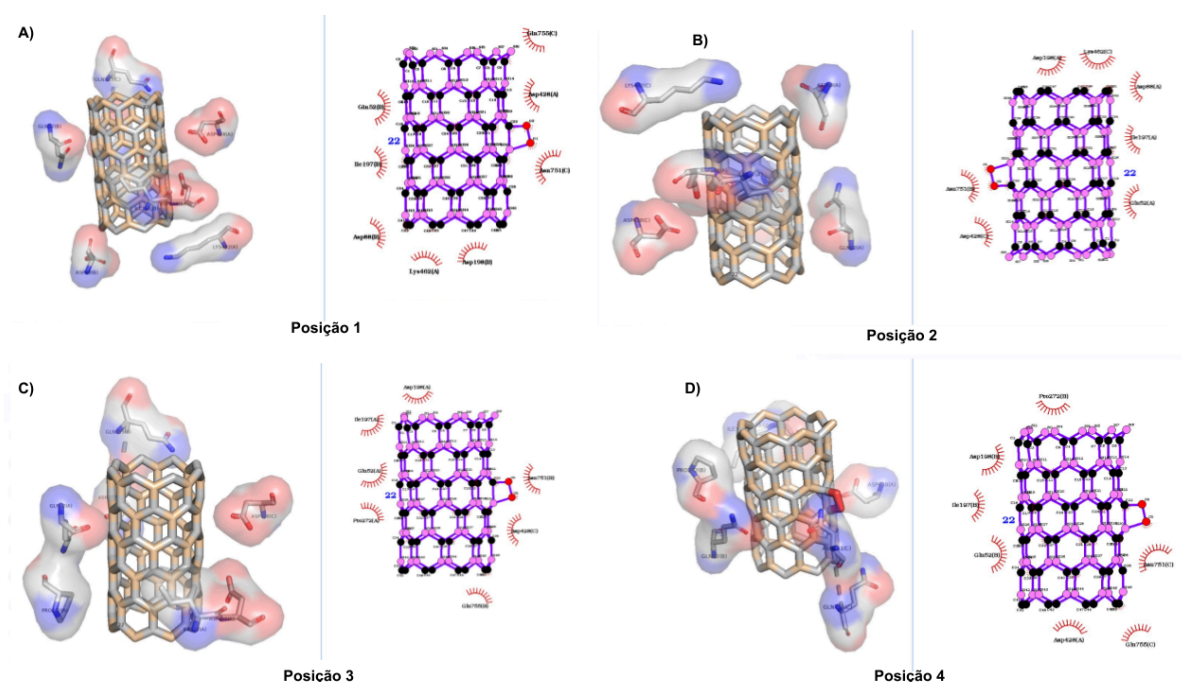
O SiCNT-OH-H, demonstrou uma energia de interação ligeiramente mais favorável, de -9,85 kcal/mol, mantendo o RMSD em 0,00 (ver tabela 5.5). Este modelo interage de maneira hidrofóbica com uma gama ampliada de resíduos – incluindo Gln755(B), Leu518(B), Asp428(C), Gln52(A), Asn969(A), Asn751(B), Asp148(A), Pro272(A), Ile197(A) e Leu54(A) (ver figura 5.7) – e ainda estabeleceu uma ligação de hidrogênio com o resíduo Asp53(A), a uma distância de 2,79 Å (representado pela estrutura em bolas e linhas tracejadas - ver figura 5.7a). A presença dessa ligação de hidrogênio indica uma estabilização adicional do complexo, sugerindo que a funcionalização com grupos hidroxila pode aprimorar a afinidade e a especificidade da interação com a proteína spike.

Figura 5.7 - Interação do SiCNT-OH-H com a proteína Spike - Fonte Própria



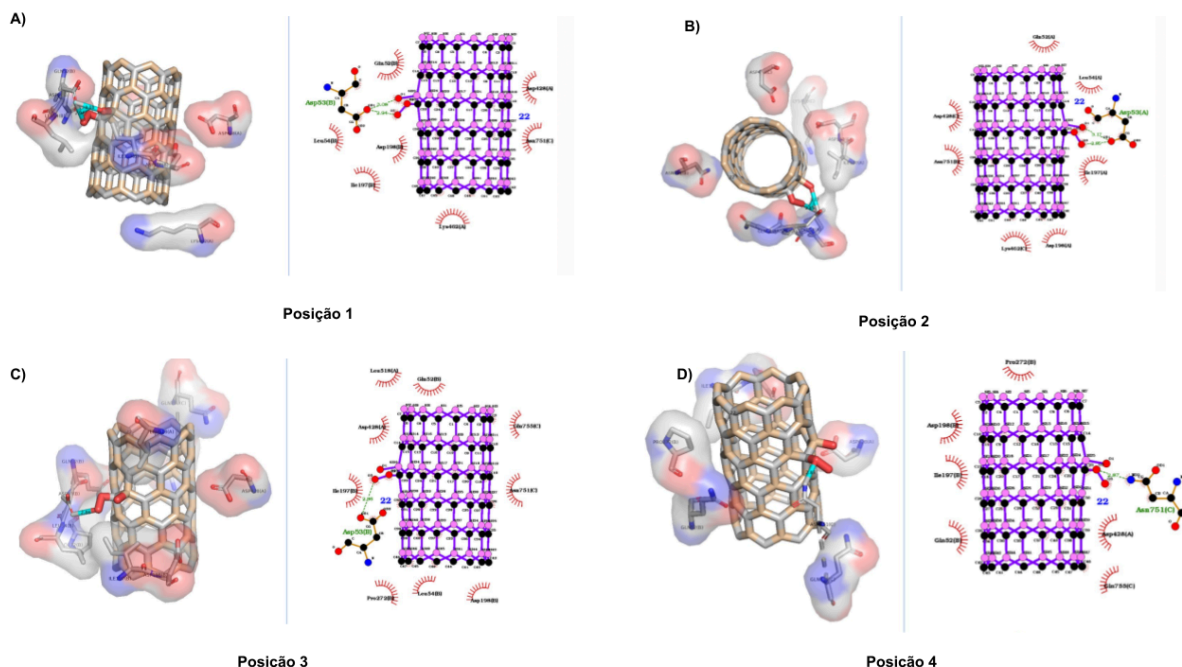
O SiCNT-O₂, exibiu uma energia de interação de -10,17 kcal/mol, também com RMSD de 0,00 (ver tabela 5.5). As interações deste modelo ocorreram exclusivamente por meio de forças hidrofóbicas, envolvendo os resíduos Gln755(C), Gln52(B), Ile197(B), Asp88(B), Lys462(A), Asp198(B), Asn751(C) e Asp428(A) (ver Figura 5.8). Embora a energia de interação seja mais baixa que a dos modelos anteriores, a ausência de ligações de hidrogênio pode indicar uma complexação menos robusta, possivelmente resultando em uma menor capacidade de interferir com a função da proteína.

Figura 5.8 - Interação do SiCNT-O₂ com a proteína Spike - Fonte Própria



Por fim, o modelo SiCNT-OOH-OH apresentou a energia de interação mais favorável, de -10,31 kcal/mol, mantendo a estabilidade com RMSD de 0,00. Este modelo estabeleceu interações hidrofóbicas com os resíduos Gln52(B), Leu54(B), Asp198(B), Ile197(B), Lys462(A), Asn751(C) e Asp428(A) (ver Figura 5.9) e, de forma notável, formou duas ligações de hidrogênio com o resíduo Asp53(B). A primeira interação ocorreu via a porção OOH a uma distância de 2,94 Å e a segunda via a porção OH a 3,08 Å (ver Figura 5.9a). Essa combinação de interações hidrofóbicas e ligações de hidrogênio sugere um complexo de alta estabilidade, capaz de induzir alterações conformacionais mais pronunciadas na proteína spike.

Figura 5.9 - Interação do SiCNT-OOH-OH com a proteína Spike - Fonte Própria



Em termos de mecanismos moleculares, as interações hidrofóbicas favorecem o encaixe do nanotubo na superfície da proteína, sendo impulsionadas pelas forças de van der Waals e pelos efeitos de dispersão quântica. Essas forças surgem de flutuações instantâneas na densidade eletrônica, conforme descrito pela Teoria da Densidade Funcional (DFT) (MORGON, Nelson H. *et al.* 1995), que promovem uma atração entre as regiões não polares sem a necessidade de ligações químicas tradicionais. Enquanto as ligações de hidrogênio atuam como “âncoras” que fixam o material de forma mais permanente. Do ponto de vista quântico, essas ligações podem ser entendidas pelo acoplamento entre os orbitais atômicos de doadores e receptores, onde a sobreposição de orbitais estabiliza a distribuição eletrônica e reduz a energia potencial do sistema. Essa estabilização orbital é crucial para manter a integridade do complexo formado. Tais interações podem levar à perturbação da conformação da proteína spike, interferindo em sua capacidade de se ligar ao receptor ACE2, que é essencial para o processo de entrada viral na célula hospedeira. Assim, a combinação desses mecanismos pode resultar na inativação da proteína viral, impedindo a fusão e a subsequente infecção celular.

6 - CONCLUSÃO:

No estudo do nanotubo de carbeto de silício como material promissor no combate à COVID-19 os parâmetros estruturais do SiCNT foram determinados por métodos *ab initio* e observou-se um band gap obtido na simulação de 2,41 eV, valor próximo ao band gap experimental que é de 2,67 eV, além disso valores de médias de comprimento de ligação foram determinados e apresentam um valor de 1,72 Å e uma média de ângulo de ligação de 119,20°. Descritores moleculares como afinidade eletrônica, energia de ionização, eletronegatividade, eletrofilicidade, dureza química, suavidade química e potencial químico também foram determinados afim de prever a possível interação do modelo escolhido com H₂O e ³O₂. Essas determinações foram importantes para verificar se o modelo produz espécies funcionalizadas. A adsorção das moléculas apresentou valores de -2,08 eV para a molécula de H₂O na formação dos radicais OH e +0,2 eV para a interação com ³O₂ na formação do O₂⁻, quando observados separadamente. Na interação conjugada do modelo, primeiramente com a H₂O e posteriormente com o ³O₂, observou-se uma variação energética favorável para a formação O₂H e ·OH. Posteriormente cálculos de docking molecular foram realizados afim de determinar a interação dos radicais formados com a proteína Spike do SARS-CoV-2, na primeira interação com o modelo observou-se uma conformação de ligação estável apresentada pela energia de -9,11 kcal/mol, a interação do SiCNT-OH-H, apresentou energia de -9,85 kcal/mol indicando estabilidade de ligação, a outra interação se deu entre a proteína Spike e o SiCNT-O₂, apresentando também estabilidade energética num valor de -10,17 kcal/mol, a última interação calculada em docking foi a do modelo SiCNT-O₂H-OH, que apresentou a estabilização mais favorável com uma variação de energia de -10,31 kcal/mol. Conclui-se que a funcionalização dos nanotubos de carbeto de silício com grupos hidroxila e peróxido potencializa a interação com a proteína spike, com destaque para o modelo SiCNT-OOH-OH, que demonstrou a maior afinidade e estabilidade de complexação. Esses achados sugerem que a aplicação de materiais nanotecnológicos, especialmente aqueles com modificações superficiais específicas, pode representar uma estratégia promissora para a inibição da atividade da proteína spike e, conseqüentemente, para o desenvolvimento de abordagens antivirais inovadoras.

7. REFERÊNCIA

AGARWAL, Shweta; MEHROTRA, R. J. J. C. An overview of molecular docking. **JSM chem**, v. 4, n. 2, p. 1024-1028, 2016.

ALI, Amanat; VIJAYAN, Ranjit. Dynamics of the ACE2–SARS-CoV-2/SARS-CoV spike protein interface reveal unique mechanisms. **Scientific reports**, v. 10, n. 1, p. 14214, 2020.

ALVES, Júlia Maria Aragon. **Desenvolvimento de conjuntos de base para os átomos H, Li, BF, Na e Al-Cl em ambiente aniônico utilizando o método da coordenada geradora Hartree-Fock polinomial**. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

ASHOUR, Nada A. et al. A systematic review of the global intervention for SARS-CoV-2 combating: from drugs repurposing to molnupiravir approval. **Drug design, development and therapy**, p. 685-715, 2023.

ASSIS, Marcelo et al. PVC-SiO₂-Ag composite as a powerful biocide and anti-SARS-CoV-2 material. **Journal of Polymer Research**, v. 28, n. 9, p. 361, 2021.

ASSIS, Marcelo et al. Enhanced antimicrobial activity of Cu-decorated graphene nanoplatelets and carbon nanotubes. **Surfaces and Interfaces**, v. 53, p. 105074, 2024.

BAILDYA, Nabajyoti et al. Comparative study of the efficiency of silicon carbide, boron nitride and carbon nanotube to deliver cancerous drug, azacitidine: A DFT study. **Computers in Biology and Medicine**, v. 154, p. 106593, 2023.

BARATON, MARIE-ISABELLE. Surface functionalization of semiconductor nanoparticles. **Life Cycle Analysis of Nanoparticles: Reducing Risk and Liability**, p. 249, 2015.

BISCHOFF, Thomas; RESHETNYAK, Igor; PASQUARELLO, Alfredo. Band gaps of liquid water and hexagonal ice through advanced electronic-structure calculations. **Physical Review Research**, v. 3, n. 2, p. 023182, 2021.

BISHT, Ayushi et al. Nanomaterial based biosensors for detection of viruses including SARS-CoV-2: a review. **Journal of analysis and testing**, v. 5, n. 4, p. 327-340, 2021.

BROCKS, G.; TOL, A. Small band gap semiconducting polymers made from dye molecules: polysquaraines. **The Journal of Physical Chemistry**, v. 100, n. 5, p. 1838-1846, 1996.

CAO, Fenglei et al. Theoretical study of O₂ molecular adsorption and dissociation on silicon carbide nanotubes. **The Journal of Physical Chemistry C**, v. 114, n. 2, p. 970-976, 2010.

CHIGO ANOTA, E.; COCOLETZI, Gregorio. Influence of point defects on the structural and electronic properties of SiC nanotubes. **Open Chemistry**, v. 12, n. 1, p. 53-59, 2014.

CHIU, Chan-Wen et al. Rapid SARS-CoV-2 diagnosis using disposable strips and a metal-oxide-semiconductor field-effect transistor platform. **Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena**, v. 40, n. 2, p. 023204, 2022.

CHU, C. M. et al. Role of lopinavir/ritonavir in the treatment of SARS: initial virological and clinical findings. **Thorax**, v. 59, n. 3, p. 252-256, 2004.

COUMAR, Mohane S. (Ed.). **Molecular docking for computer-aided drug design: Fundamentals, techniques, resources and applications**. Academic Press, 2021.

DE MAIO, Flavio et al. Graphene nanoplatelet and Graphene oxide functionalization of face mask materials inhibits infectivity of trapped SARS-CoV-2. **Isience**, v. 24, n. 7, p. 102788, 2021.

DE MORAES, Eduardo. **Modelo teórico de nanotubos de óxido de zinco**. 2008. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Goiás (Brazil).

Definition of spike protein from the Cambridge Advanced Learner's Dictionary & Thesaurus © Cambridge University Press; obtido em

<https://dictionary.cambridge.org/dictionary/english/spike-protein> em 25-07-2024 às 15:41.

DELANO, Warren L. Pymol reference guide. **California, USA, Scientific**, 2004.

DOS REIS VARGAS, Marcos. **Estudo teórico de nanotubos de carbono, germânio e Silício**. 2009. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Goiás (Brazil).

DUARTE, Hélio Anderson. Índices de reatividade química a partir da teoria do funcional de densidade: formalismo e perspectivas. **Química Nova**, v. 24, n. 4, p. 501-508, 2001.

FOFFA, Ilenia et al. A Copper nanoparticles-based polymeric spray coating: Nanoshield against Sars-Cov-2. **Journal of Applied Biomaterials & Functional Materials**, v. 20, p. 22808000221076326, 2022.

GUAN, Wei-jie et al. Clinical characteristics of coronavirus disease 2019 in China. **New England journal of medicine**, v. 382, n. 18, p. 1708-1720, 2020.

HARBOLA, Manoj K.; CHATTARAJ, Pratim K.; PARR, Robert G. Aspects of the softness and hardness concepts of density-functional theory. **Israel journal of chemistry**, v. 31, n. 4, p. 395-402, 1991.

HARRIS, Peter JF. Carbon nanotube composites. **International materials reviews**, v. 49, n. 1, p. 31-43, 2004.

HUANG, S.-P. et al. First-principles study: size-dependent optical properties for semiconducting silicon carbide nanotubes. **Optics Express**, v. 15, n. 17, p. 10947-10957, 2007.

JEAN, Shio-Shin; LEE, Ping-Ing; HSUEH, Po-Ren. Treatment options for COVID-19: The reality and challenges. **Journal of microbiology, immunology and infection**, v. 53, n. 3, p. 436-443, 2020.

JENSEN, Frank. **Introduction to computational chemistry**. John wiley & sons, 2017. IN. TRSIC, Milan e PINTO, Melissa F. Siqueira. **Química quântica: fundamentos e aplicações**. . Barueri: Manole. . Acesso em: 12 jan. 2025. , 2009

JUNG, Sunghoon et al. Copper-coated polypropylene filter face mask with SARS-COV-2 antiviral ability. **Polymers**, v. 13, n. 9, p. 1367, 2021.

KARELSON, Mati; LOBANOV, Victor S.; KATRITZKY, Alan R. Quantum-chemical descriptors in QSAR/QSPR studies. **Chemical reviews**, v. 96, n. 3, p. 1027-1044, 1996.

KAYA, Savas; PUTZ, Mihai V. Atoms-in-molecules' faces of chemical hardness by conceptual density functional theory. **Molecules**, v. 27, n. 24, p. 8825, 2022.

KELLER, Nicolas et al. Synthesis and characterisation of medium surface area silicon carbide nanotubes. **Carbon**, v. 41, n. 11, p. 2131-2139, 2003.

KUFAREVA, Irina; ABAGYAN, Ruben. Methods of protein structure comparison. **Homology modeling: Methods and protocols**, p. 231-257, 2012.

LOBATO, Júlio Cesar Mendes et al. Interactions between carbon nanotubes and external structures of SARS-CoV-2 using molecular docking and molecular dynamics. **Journal of Molecular Structure**, v. 1286, p. 135604, 2023.

MACHHI, Jatin et al. The natural history, pathobiology, and clinical manifestations of SARS-CoV-2 infections. **Journal of Neuroimmune Pharmacology**, v. 15, n. 3, p. 359-386, 2020.

MAKUŁA, Patrycja; PACIA, Michał; MACYK, Wojciech. How to correctly determine the band gap energy of modified semiconductor photocatalysts based on UV-Vis spectra. **The journal of physical chemistry letters**, v. 9, n. 23, p. 6814-6817, 2018.

MARTINEZ, Miguel Angel. Compounds with therapeutic potential against novel respiratory 2019 coronavirus. **Antimicrobial agents and chemotherapy**, v. 64, n. 5, p. 10.1128/aac. 00399-20, 2020.

MENDONÇA, Pedro Simão Sousa et al. Single-walled silicon nanotube as an exceptional candidate to eliminate SARS-CoV-2: a theoretical study. **Journal of Biomolecular Structure and Dynamics**, v. 41, n. 7, p. 3042-3051, 2023.

MENON, Madhu et al. Structure and stability of SiC nanotubes. **Physical Review B**, v. 69, n. 11, p. 115322, 2004.

MILOVANOVIĆ, Milan R. et al. How flexible is the water molecule structure? Analysis of crystal structures and the potential energy surface. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 22, n. 7, p. 4138-4143, 2020.

MITTAL, Vikas. **Polymer nanotubes nanocomposites: synthesis, properties and applications**. John Wiley & Sons, 2014.

MOHANTY, Madhuchhanda; MOHANTY, Priti S. Molecular docking in organic, inorganic, and hybrid systems: A tutorial review. **Monatshefte für Chemie-Chemical Monthly**, v. 154, n. 7, p. 683-707, 2023.

MOPAC 2012, James J. P. Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, Co, USA, <http://openmopac.net>, 2012.

MORGON, Nelson H.; CUSTODIO, Rogério. Teoria do funcional de densidade. **Química Nova**, v. 18, n. 1, p. 44-55, 1995.

MORRIS, Garrett M. et al. AutoDock. **Automated docking of flexible ligands to receptor-User Guide**, 2001.

MORRIS, Garrett M. et al. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility. **Journal of computational chemistry**, v. 30, n. 16, p. 2785-2791, 2009.

MULLIKEN, Robert S. A new electroaffinity scale; together with data on valence states and on valence ionization potentials and electron affinities. *The Journal of Chemical Physics*, v. 2, n. 11, p. 782-793, 1934.

NALEWAJSKI, Roman F.; KORCHOWIEC, Jacek; ZHOU, Zhongxiang. Molecular hardness and softness parameters and their use in chemistry. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 34, n. S22, p. 349-366, 1988.

NAVANIETHA KRISHNARAJ, R. et al. Investigations on the antiretroviral activity of carbon nanotubes using computational molecular approach. **Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening**, v. 17, n. 6, p. 531-535, 2014.

PAGADALA, Nataraj S.; SYED, Khajamohiddin; TUSZYNSKI, Jack. Software for molecular docking: a review. **Biophysical reviews**, v. 9, n. 2, p. 91-102, 2017.

PAGANI, Isabel et al. Origin and evolution of SARS-CoV-2. **The European Physical Journal Plus**, v. 138, n. 2, p. 157, 2023.

PAL, Ranita; CHATTARAJ, Pratim Kumar. Electrophilicity index revisited. **Journal of Computational Chemistry**, v. 44, n. 3, p. 278-297, 2023.

PARR, Robert G.; SZENTPÁLY, László v; LIU, Shubin. Electrophilicity index. **Journal of the American Chemical Society**, v. 121, n. 9, p. 1922-1924, 1999.

PARTHASARATHI, R. et al. Electrophilicity index as a possible descriptor of biological activity. **Bioorganic & medicinal chemistry**, v. 12, n. 21, p. 5533-5543, 2004.

PEARSON, Ralph G. **Chemical hardness**. Weinheim: Wiley-VCH, 1997. v. 10, p. 38-40, 1997.

PERDEW, John P. Density functional theory and the band gap problem. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 30, n. 3, p. 451-451, 1986.

PEREIRA, Tamires Lima. **Utilização da Teoria do Funcional da Densidade no estudo das propriedades eletrônicas e ópticas de diferentes ftalocianinas**. 2018.

PESSÔA, Kelly Fernandes et al. **Revisão de alguns principais métodos utilizados em modelagem molecular. Parte II-Métodos quânticos**. 2018.

PICKUP, B. T.; GOSCINSKI, O. Direct calculation of ionization energies: I. Closed shells. **Molecular Physics**, v. 26, n. 4, p. 1013-1035, 1973.

RAJABATHAR, Jothi Ramalingam et al. Review on carbon nanotube varieties for healthcare application: effect of preparation methods and mechanism insight. **Processes**, v. 8, n. 12, p. 1654, 2020.

RIENSTRA-KIRACOFÉ, Jonathan C. et al. Atomic and molecular electron affinities: photoelectron experiments and theoretical computations. **Chemical reviews**, v. 102, n. 1, p. 231-282, 2002.

RODRIGUES, A. M. et al. Encapsulation ability of silicon carbide and boron nitride nanotubes for spilanthol molecule. **Journal of Nanostructure in Chemistry**, v. 11, p. 203-213, 2021.

SCHNEIDER, Wolfgang B.; AUER, Alexander A. Constant chemical potential approach for quantum chemical calculations in electrocatalysis. **Beilstein Journal of Nanotechnology**, v. 5, n. 1, p. 668-676, 2014.

SEIF, Ahmad; AHMADI, Temer S.; ROUZBEHANI, Goudarz M. Computation of the Nuclear Magnetic Resonance Parameters of H-Capped Zigzag and Armchair Single-Walled SiC Nanotubes. **Journal of Computational and Theoretical Nanoscience**, v. 7, n. 10, p. 2008-2012, 2010.

SEMINARIO, Jorge M. **Modern density functional theory: a tool for chemistry**. Elsevier, 1995.

SETOODEH, A. R.; JAHANSHAHI, M.; ATTARIANI, Hamed. Atomistic simulations of the buckling behavior of perfect and defective silicon carbide nanotubes. **Computational materials science**, v. 47, n. 2, p. 388-397, 2009.

SHERRILL, C. David. An introduction to Hartree-Fock molecular orbital theory. **School of Chemistry and Biochemistry Georgia Institute of Technology**, 2000.

SILVA, Valter H. et al. Aproximações da Mecânica Quântica no Estudo de Propriedades Moleculares. **Revista Processos Químicos**, v. 3, n. 6, p. 9-16, 2009.

STEWART, James JP. Optimization of parameters for semiempirical methods II. Applications. **Journal of computational chemistry**, v. 10, n. 2, p. 221-264, 1989.

STEWART, James JP. Optimization of parameters for semiempirical methods V: Modification of NDDO approximations and application to 70 elements. **Journal of Molecular modeling**, v. 13, p. 1173-1213, 2007.

STEWART, James JP. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. **Journal of molecular modeling**, v. 19, p. 1-32, 2013.

TALEBIAN, Sepehr et al. Nanotechnology-based disinfectants and sensors for SARS-CoV-2. **Nature nanotechnology**, v. 15, n. 8, p. 618-621, 2020.

TONY, Voo Chung Sung et al. Effective synthesis of silicon carbide nanotubes by microwave heating of blended silicon dioxide and multi-walled carbon nanotube. **Materials Research**, v. 20, p. 1658-1668, 2017.

UNO, Yoshiharu. Camostat mesilate therapy for COVID-19. **Internal and emergency medicine**, v. 15, n. 8, p. 1577-1578, 2020.

WALLACE, Andrew C.; LASKOWSKI, Roman A.; THORNTON, Janet M. LIGPLOT: a program to generate schematic diagrams of protein-ligand interactions. **Protein engineering, design and selection**, v. 8, n. 2, p. 127-134, 1995.

WALLS, Alexandra C. et al. Structure, function, and antigenicity of the SARS-CoV-2 spike glycoprotein. **Cell**, v. 181, n. 2, p. 281-292. e6, 2020.

WU, I. J.; GUO, G. Y. Optical properties of SiC nanotubes: An ab initio study. **Physical Review B**, v. 76, n. 3, p. 035343, 2007.

WU, J.; WALUKIEWICZ, W. Band gaps of InN and group III nitride alloys. **Superlattices and Microstructures**, v. 34, n. 1-2, p. 63-75, 2003.

YU, Xiang; LI, Na. Understanding the beginning of a pandemic: China's response to the emergence of COVID-19. **Journal of Infection and Public Health**, v. 14, n. 3, p. 347-352, 2021.47

ZHAO, Jing-xiang; DING, Yi-hong. Can silicon carbide nanotubes sense carbon dioxide?. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v. 5, n. 4, p. 1099-1105, 2009.

8. ANEXOS

ANEXO I - REFERENCIAL TEÓRICO

MÉTODO HARTREE-FOCK

O método Hartree-Fock (HF) se propõe a solucionar a equação de Schrödinger através do método do campo autoconsistente, Self-Consistent Field-SCF. Essa é uma metodologia iterativa em que uma função de onda inicial é proposta e a partir dela as equações são resolvidas variacionalmente até encontrar uma nova função e uma nova energia correspondente à essa. (ALVES, Júlia Maria Aragon)

A alta complexidade para a resolução dos determinantes de Slater leva a utilização de conjuntos de função de base na realização de estudos teóricos. As funções do tipo Gaussianas são as mais utilizadas pois permitem respostas mais simples para as integrais associadas. Escrevemos esse tipo de equação utilizando as coordenadas cartesianas como na equação AI.1: (DE MORAES, Eduardo; 2008)

$$G_{(x,y,z)} = Nx^l y^m z^n e^{-ar^2} \quad \text{AI.1}$$

onde l, m e n são números inteiros, N é a constante de normalização e r pode ser obtido a partir da equação AI.2: (DE MORAES, Eduardo; 2008)

$$r = \sqrt{\quad} \quad \text{AI.2}$$

Com uma grande possibilidade de aplicações, o método Hartree-Fock é largamente utilizado em Química Quântica para explicar o comportamento dos sistemas e prever suas energias. O desenvolvimento de um novo método se deu pela busca do ganho de velocidade computacional que a nova técnica apresentou, a seguir discutimos sua base.

TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE (DFT)

Prever propriedades moleculares quantitativas ou tendências qualitativas dessas propriedades e explicar a natureza da ligação química estão entre os principais objetivos da Química Quântica. Nesse contexto surgiu a teoria do funcional de densidade (DFT em inglês - Density Functional Theory), que apareceu

como uma alternativa para os métodos *ab initio* e semi empíricos. (MORGON, Nelson H. *et al.*;))

Os métodos tradicionais da Química Quântica são baseados em termos das funções de ondas de muitos elétrons $\Psi(r_1, \dots, r_N)$. Já a DFT descreve o sistema eletrônico em função da densidade eletrônica, $\rho(r)$, que ao contrário dos outros métodos, permite uma formulação conceitual mais acessível. (PEREIRA, Tamires Lima.)

A vantagem desse método para os métodos *ab initio* está no ganho de velocidade computacional e espaço em memória. Considerando-se um sistema com n funções de base, o esforço computacional do estudo utilizando DFT aumenta na ordem de n^3 , enquanto que para os métodos Hartree-Fock, por exemplo, o aumento é na ordem de n^4 ou n^5 para técnicas de interação de configuração. (MORGON, Nelson H. *et al.*)

Hohenberg e Khon (1964), trabalharam na determinação da densidade eletrônica de um sistema, determinando a energia exata de um sistema de muito corpos, trabalhando com as equações AII.3 e AII.4: (JENSEN, 2017 apud TRSIC; PINTO, 2009)

$$E_v[\rho(r)] = \int x(r)\rho(r)dr + F[\rho] \quad \text{AII.3}$$

$$F[\rho] = \Psi | T^{\wedge} + V_{ee}^{\wedge} | \Psi > \quad \text{AII.4}$$

MÉTODOS SEMI EMPÍRICOS

A base dos principais métodos semi empíricos é o NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap), que inclui o MNDO (Modified Neglect of Diatomic Overlap), utilizados na otimização dos nanotubos de carbono, de silício e de germânio (DOS REIS VARGAS, Marcos, 2009) e o AM1 (Austin Model 1) que caracteriza as propriedades do nanotubo de ZnO (DE MORAES, Eduardo, 2008).

Parametrizando 21 elementos das bases de formulações do AM1, Stewart, em 1989, desenvolveu o método PM3 (Parametrized Model 3). A redução de quatro gaussianas para duas, na função de repulsão nuclear, foi a principal inovação (STEWART, James JP, 1989) Posteriormente, ele aprimorou esse modelo e criou o PM5, incorporado ao programa MOPAC (Molecular Orbital PACKage) 2002,

aumentando o número de elementos parametrizados para 37. Em seguida, no MOPAC 2009, introduziu o método PM6, ampliando esse número para 70 (STEWART, James JP, 2007). Já no MOPAC 2012, foi implementado o método PM7, que refinou os parâmetros do PM6 (STEWART, James JP, 2013).

O PM7 representa uma evolução dos métodos AM1 e PM3, incorporando 83 parametrizações baseadas em dados experimentais e cálculos ab initio para uma ampla gama de elementos químicos, incluindo hidrogênio, metais de transição e lantanídeos. Além de reduzir o tempo computacional, o PM7 apresenta maior precisão e corrige erros significativos observados nos métodos AM1 e PM3. (MOPAC 2012)

DOCKING MOLECULAR

O docking molecular pode ser definido como um processo de modelagem molecular que tem a capacidade da previsão da orientação de ligação preferencial de uma biomolécula com outra, resultando um complexo estável. Conhecer o mecanismo das interações entre biomoléculas pode ser útil na análise das energias de associação ou nas energias de ligações (COUMAR, Mohane S., 2021).

Em sua abordagem inicial o docking era indicado como a interação entre dois corpos rígidos, na hipótese chave-fechadura, e a afinidade entre os compostos é diretamente proporcional a um ajuste geométrico entre as suas formas. Com o desenvolvimento da técnica e discussões posteriores sobre o assunto, introduziu-se a determinação de que ambos os compostos, ligante e receptor, devem ser vistos como flexíveis durante o encaixe, cada movimento vai ter uma influência sobre o resultado final da interação, influenciando cadeias laterais do receptor, o que confere a esse modelo uma ordem de magnitude maior na visão da liberdade do encaixe ligante/receptor. Dessa forma, o desenvolvimento da técnica se tornou mais preciso na previsão do modo de ligação de uma molécula, considerando essa interação flexível (PAGADALA, Nataraj S., et al, 2017).

Vários programas para o desenvolvimento do docking foram escritos e pode-se citar aqui o DOCK, o ICM, o MCDock, o Surflex, o AutoDock, entre vários que existem. O AutoDock foi o software utilizado no desenvolvimento deste trabalho, esse programa em sua implementação original, apresentou um método equilibrado,

que combina exploração configuracional eficiente com avaliação energética robusta. A energia de cada configuração tem sua estimativa feita de maneira ágil e para tanto se utiliza os potenciais de afinidade molecular pré-calculados em uma grade tridimensional (método conhecido como grid-based energy evaluation). Nesse processo a contribuição do usuário é mínima e se resume em: definir o volume retangular de busca ao redor da proteína; Especificar as ligações rotativas do substrato; Fornecer uma configuração inicial e com esses dados o programa fará o docking de maneira automática (MORRIS, Garrett M. et al., 2001).

A interpretação de resultados da técnica de docking é feita pelos valores de afinidade em Å (distância quadrática média - RMSD) e a energia livre de ligação expressa em kcal/mol ou kj/mol. O RMSD é a medida da similaridade entre duas coordenadas sobrepostas e é determinada pela equação A1.5:

$$RMSD = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2} \quad A1.5$$

Onde a média é realizada sobre os n pares de átomos equivalentes e d_i é a distância entre dois átomos no i-enésimo par. Os valores mais próximos a zero são os de maior interesse e indicam uma boa interação entre o ligante e a estrutura (KUFAREVA, Irina, et al, 2012). As energias livres geradas pelo docking também são utilizadas para interpretar seus resultados, quando essa técnica é aplicada o intuito é obter um acoplamento que apresente a menor energia livre para o sistema e a energia livre final leva em consideração energias de atração e repulsão, energia de formação de interações de hidrogênio, energias eletrostáticas, energia livre de torção, energia interna final e energias de sistemas não ligados, todas essas variáveis são consideradas quando o programa gera a energia livre de ligação (AGARWAL, Shweta, et al, 2016).

ANEXO II - DESCRITORES MOLECULARES

Os descritores moleculares são ferramentas valiosas na predição das propriedades das moléculas e na proposição de possíveis interações que essas moléculas podem fazer. A busca por variados descritores tem crescido por se

acreditar que eles são fundamentais na resolução de questões em estudo de estruturas e suas interações (KARELSON, Mati, et al. 1996).

Alguns descritores utilizados para entender as interações do modelo com a água e o oxigênio são:

- Dureza global química é a capacidade de resistência contra a polarização da nuvem de elétrons de um átomo, íon ou molécula. Ao propor os princípios da teoria ácido-base duro e mole Pearson indicou a existência de uma dureza máxima, sugerindo uma tendência das moléculas de serem o mais duras possível. Essa ideia indica que a dureza química é um indicador de estabilidade química (PEARSON, Ralph G. 1997; KAYA, Savas et al, 2022).
- Eletronegatividade, de acordo com Mulliken essa propriedade é determinada pela média da soma da energia de ativação com a afinidade eletrônica (MULLIKEN, Robert S. 1934). Essa definição era utilizada para determinar o valor de eletronegatividade atômica, o que

não se aplicaria aos nossos sistemas. Mas Pearson discute em seu trabalho que os cálculos em DFT determinam energia de ionização e afinidade eletrônica para qualquer sistema, o que permite aplicar a definição de Mulliken para nossos cálculos (PEARSON, Ralph G. 1997).

- Potencial Químico por definição pode ser determinado pela derivada da energia em relação ao número de elétrons (eq. AII.1).

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}$$

AII.1

Outra maneira de definir essa grandeza, por aproximação, é indicando que o potencial químico vale o negativo da eletronegatividade de Mulliken (SCHNEIDER, Wolfgang B, et al, 2014).

- Índice de eletrofilicidade é medida da redução de energia devido ao fluxo máximo de elétrons entre doador e aceitador de elétrons (PARR, Robert G. et al, 1999). A eletrofilicidade é utilizada para indicar quem, em uma interação, terá a tendência a ser o nucleófilo e quem será eletrófilo. Essa grandeza permite uma classificação quantitativa da

natureza eletrofílica global de uma molécula (PARTHASARATHI, R. et al, 2004).

- Suavidade Química que por definição é derivada do número de elétrons em relação ao potencial químico (eq. AII.2).

$$S = \frac{\partial N}{\partial \mu}$$

AII.2

Mas que por aproximação pode ser entendida como o inverso da dureza global (HARBOLA, Manoj K, 1991).

ANEXO III - TABELA COM NOMES DOS RESÍDUOS DO DOCKING MOLECULAR

Os resíduos do Docking molecular seguem uma lógica de organização da sua sigla que é:

Gln755(B)

- Gln refere-se ao aminoácido Glutamina.
- 755 indica a posição do resíduo na sequência da proteína.
- (C) representa a cadeia proteica à qual esse resíduo pertence.

Tabela 1 - Siglas dos aminoácidos dos resíduos do Docking Molecular

Sigla	Aminoácido
Asn	Asparagina
Lys	Lisina
Asp	Ácido aspártico
Ile	Isoleucina
Leu	Leucina
Pro	Prolina
Gln	Glutamina

9. APÊNDICE

APÊNDICE I :

Tabela 1 - Comparação das energias (KJ/mol) em relação base, métodos e funcionais híbridos

Bases	Método			
	HF	DFT		
		Funcionais Híbridos		
		B3LYP	CAM-B3LYP	B3PW91
3-21G	-40990593,41	-41093431,87	-41088350,64	-41085991,32
6-21G	-41197356,46	-41302720,93	-41297729,57	-41295198,02
6-31G	-41200008,55	-41305558,29	-41300619,57	-41298003,90
6-311G	-41203904,27	-41310165,65	-41305364,32	-41302337,24

APÊNDICE II:

SCRIPTS PARA CONSTRUÇÃO DA GEOMETRIA DO NANOTUBO DE SiC

```
#!/bin/bash
#builds the Cartesian coordinates of the Silicon nanotube in zigzag chirality for
n=diameter and m=length
#questions send to: prof.jeziel@gmail.com
#Diego
# How to run? ./name-shell.sh $1 $2 $3

n=$1 # number of units in units SiC
m=$2 # number of levels
d=$3 # bond length

## constants

pi=`echo "scale=6; 4*a(1)"|bc -l`
D=`echo "scale=6; ${d}*sqrt(3) "|bc -l` #  $D=2*d*\cos 30$ 
r=`echo "scale=6; (${D}/2)*(1/(s(${pi}/${n}))) "|bc -l`
te1=`echo "scale=6; 2*${pi}/${n} "|bc -l`
te2=`echo "scale=6; ${pi}/${n} "|bc -l`
z1=`echo " scale=6; 0.000001 "|bc -l`
z2=`echo " scale=6; ${d}*s(${pi}/6) "|bc -l`

# Cartesian header

nome=nanosizig${n}
nat=`echo " 2*${n}*${m} "|bc`
echo " ${nat} " > ${nome}.mol
echo " " >> ${nome}.mol

j=1
```



```
while [ ${j} -le ${m} ]
```

```
do
```

```
i=1
```

```
while [ ${i} -le ${n} ]
```

```
do
```

```
x1=` echo " scale=6; ${r}*c(${i}*${te1} + (${j} - 1)*${te2})"|bc -l `
y1=` echo " scale=6; ${r}*s(${i}*${te1} + (${j} - 1)*${te2})"|bc -l `
x2=` echo " scale=6; ${r}*c(${i}*${te1} + ${te2} + (${j} - 1)*${te2})"|bc -l `
y2=` echo " scale=6; ${r}*s(${i}*${te1} + ${te2} + (${j} - 1)*${te2})"|bc -l `
echo "Si ${x1} ${y1} ${z1} " >> ${nome}.mol
echo "C  ${x2} ${y2} ${z2} " >> ${nome}.mol
i=` expr ${i} + 1 `
```

```
done
```

```
j=` expr ${j} + 1 `
z1=` echo " scale=6; ${z1} + (3/2)*${d} "|bc -l `
z2=` echo " scale=6; ${z2} + (3/2)*${d} "|bc -l `
```

```
done
```