

# Modelagem e Simulação na Pesquisa e Desenvolvimento de Nanoestruturas

Faculdade Unyleya \*

Jullyano Lino da Silva<sup>†</sup>

17/01/2022

## Resumo

Dentro do escopo da nanomodelagem, este trabalho apresenta considerações críticas a respeito da modelagem e simulação na pesquisa e desenvolvimento de Nanoestruturas, bem como conceitos, vantagens e limitações de técnicas relacionadas, conforme as referências propostas pelo curso de pós-graduação *lato sensu* Engenharia da Nanotecnologia da Faculdade Unyleya.

**Palavras-chaves:** Nanomodelagem. Simulação. Nanoestruturas.

## Introdução

A nanotecnologia combina a química, a engenharia biológica e ciências físicas desde as pioneiras investigações médicas clínicas que utilizaram nanoestruturas nos processos de identificação e de caracterização de várias funções moleculares complexas no processo de tratamento do câncer (SHARMA et al., 2020).

Os diferentes domínios da nanotecnologia (nanomedicina, nanoeletrônica, nanofabricação e nanomáquinas) exigem a utilização de dispositivos como coletores de nanoenergia, ressonadores nanomecânicos, osciladores, detectores de carga, sensores de massa em nano-escala, dispositivos de emissão de campo, tecido biológico e nanoatuadores eletromecânicos (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020).

Esses dispositivos são geralmente fabricados usando diferentes nanoestruturas fundamentais (figura 1, página 2) e nanoestruturas de carbono (figura 2, página 2).

Nesse sentido, a nanoinformática auxilia pesquisas de projeto e análise dos efeitos das nanopartículas em medicamentos, sob uma orientação agregada, molecular, celular, tecidual e orgânica. Além disso, viabiliza a compreensão das propriedades fisiológicas e bioquímicas delas juntamente com a avaliação de risco e análise citotóxica relacionada (SHARMA et al., 2020).

---

\* <<https://unyleya.edu.br/>>

<sup>†</sup>jullyanolino@gmail.com

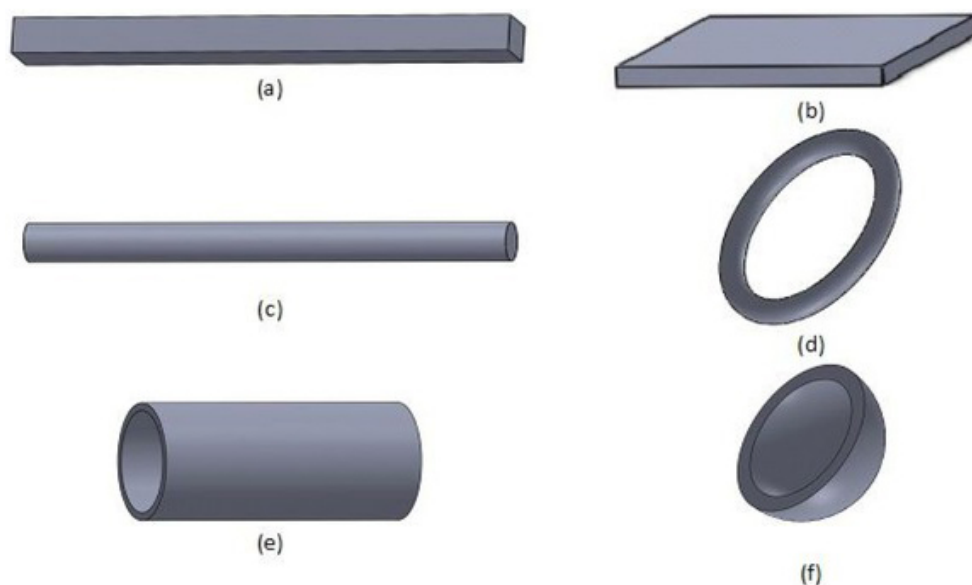


Figura 1 – Tipos de nanoestruturas fundamentais: (a) nanofeixe (b) nanoplaca (c) nanobarra (d) nanoanel (e) nanoconcha de curva simples (f) nanoshell de curva dupla. (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020)

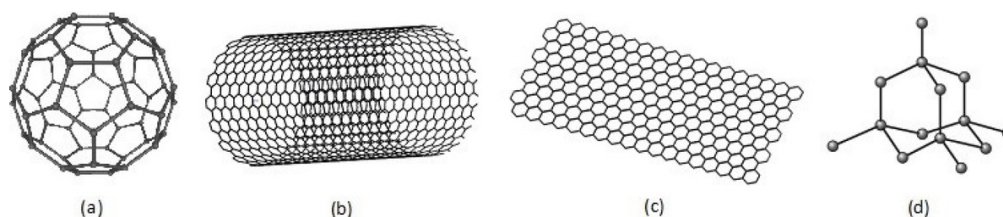


Figura 2 – Tipos de nanoestruturas de carbono: (a) fulereno (b) nanotubo (c) folha de grafeno (d) estrutura de diamante. (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020)

## 1 Modelagem e Simulação de Nanoestruturas

A modelagem computacional e a análise de interações de nanopartículas consolidam-se como uma alternativa à modelagem puramente laboratorial, otimizando recursos, como tempo e custos, fundamentais em análise de avaliação de toxicidade e de segurança em experiências *in vitro* e *in vivo* (SHARMA et al., 2020).

As ferramentas de modelagem e simulação em nanoescala são utilizadas para desenvolver nanobiomodelos refinados ou de alta qualidade com características específicas (SHARMA et al., 2020).

A modelagem e simulação de nanoestruturas envolvem: a construção computacional de nanomodelos; modelos farmacodinâmicos e farmacocinéticos; modelo de ciclo de vida de nanopartículas dentro do ser humano corpo (absorção, distribuição, metabolismo, excreção, fagocitose, imunogenicidade, análise de toxicidade); modelo de nano-QSAR; e modelo de nanopartícula e nanotoxicidade em interação com o ambiente biológico nos níveis tissular, celular e atômico (SHARMA et al., 2020).

## 2 Técnicas de Modelagem e Simulação

Vários estudos experimentais e teóricos que tratam das respostas mecânicas de nanoestruturas já foram executados. Destaca-se, porém, que é financeiramente custoso, demorado e difícil de conduzir e controlar tais experimentos e, portanto, seus progressos são limitados (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020).

Por esse motivo, as pesquisas focam na modelagem teórica. A modelagem teórica de nanoestruturas pode ser classificada em **a) modelagem atomística; b) modelagem contínua e c) modelagem contínua não-local**. (SINGHAL; EBRAHIMI; HOSSEINI, 2020).

### 2.1 Modelagem Atomística

As técnicas de modelagem atomística podem ser classificadas em três categorias principais: **dinâmica molecular (MD)**, **Monte Carlo (MC)** e ***ab initio***, em ordem de maior para menor utilização (SINGHAL; EBRAHIMI; HOSSEINI, 2020).

Tais técnicas, utilizam a minimização de energia livre para propor uma solução numérica para propriedades de sistemas complexos. Essas estratégias são capazes de calcular a energia potencial dos sistemas e permitem uma fácil compreensão do tamanho, forma, distribuição de carga e interatômica, interação intermolecular das nanopartículas em intervalos de tempo específicos (SHARMA et al., 2020).

A modelagem atomística, por requerer o uso de uma estrutura de pequena escala com um grande número de átomos/moléculas, exige um grande esforço computacional, tornando-o moroso e demorado (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020).

### 2.2 Modelagem Contínua

Nesse tipo de modelagem, as nanoestruturas são tratadas de forma homogênea e contínua enquanto suas estruturas atômicas internas não são levadas em consideração (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020). Ela é aplicada na projeção de modelos de transporte de NPs através da rede vascular (SHARMA et al., 2020).

Portanto, o custo computacional e o tempo usando a abordagem de mecânica contínua são reduzidos eliminando simulações desnecessárias (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020).

Todavia, a detecção precisa da estrutura da rede cristalina usando a abordagem da mecânica contínua ainda é duvidosa, pois efeitos em pequena escala, como forças de Van der Waals, efeitos de superfície, espaçamento de rede, forças elétricas e ligação química não pode ser negligenciados como são na técnica de modelagem contínua mecânica (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020).

### 2.3 Modelagem Contínua Não-Local

Ao contrário da modelagem contínua, na modelagem contínua não-local a tensão em um ponto de referência é considerado como uma função da deformação em cada ponto do corpo (SINGHAL; EBRAHIMI; HOSSEINI, 2020). Com base na teoria do contínuo não local, o relação constitutiva da elasticidade não-local pode ser apresentado com a forma da equação integral como:

$$\sigma_{kl,k} - \rho \ddot{u}_l = 0 \quad (1)$$

$$\sigma_{kl}(x) = \int_V \alpha(x, x') \tau_{kl}(x') dV(x') \quad (2)$$

$$\epsilon_{kl} = \frac{1}{2}(u_{k,l} + u_{l,k}) \quad (3)$$

onde  $\sigma_{kl}$  é um tensor de estresse não-local,  $\epsilon_{kl}$  o tensor de deformação,  $\rho$  a densidade,  $u_l$  o vetor de deslocamento,  $\tau_{kl}$  o tensor de estresse clássico (local),  $\alpha(x, x')$  a função que descreve a influência da deformação nos vários locais  $x'$  de estresse em uma dada localização  $x$  e  $V$  o corpo inteiro (SINGHAL; EBRAHIMI; HOSSEINI, 2020).

A modelagem contínua não-local elimina as desvantagens da modelagem atomística e da modelagem contínua. Uma conexão racional é estabelecida entre duas modelagens igualando a energia potencial molecular com a energia de deformação mecânica de um determinado volume da nanoestrutura de um modelo contínuo (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020).

O efeito do parâmetro não-local é mais proeminente na flambagem e vibração em comparação com a flexão de nanoestruturas. O aumento do parâmetro não-local leva ao declínio da carga de flambagem e da frequência natural, enquanto se aumenta a deflexão (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020).

## Considerações finais

De fato, as pioneiras pesquisas em nanomedicamentos anti-câncer naturalmente promoveram o desenvolvimento de aplicações, métodos de modelagem, armazenamento e gerenciamento de grande massa de dados heterogêneos e granulares e simulação de sistemas a partir do campo de pesquisa denominado nanoinformática.

Temos, então, que as nanoestruturas são amplamente utilizadas em sistemas e dispositivos nano e micro-dimensionados, como biossensores, nanoatuadores, nano-sondas e sistemas nano-eletromecânicos. O completo entendimento do comportamento mecânico das nanoestruturas é crucial para o desenvolvimento de projetos de nanodispositivos e sistemas.

Portanto, como citado, as vantagens orçamentárias e de redução de riscos afetos à bioconformidade e biocompatibilidade nos mais diversos ramos da nanotecnologia são fundamentais para o projeto apropriado de nanodispositivos.

# Modeling and Simulation in Research and Development of Nanostructures

Unyleya College

Jullyano Lino da Silva

17/01/2022

## Abstract

Within the scope of nanomodeling, this work presents critical considerations regarding modeling and simulation in the research and development of Nanostructures, as well as concepts, advantages and limitations of related techniques, according to the references proposed by the *lato sensu* postgraduate course Nanotechnology Engineering from Unyleya College.

**Key-words:** Nanomodeling. Simulation. Nanostructures.

---

\*[<https://unyleya.edu.br/>](https://unyleya.edu.br/)

†jullyanolino@gmail.com

## Referências

CHANDEL, V. S.; WANG, G.; TALHA, M. Advances in modelling and analysis of nano structures: a review. *Nanotechnology Reviews*, v. 9, n. 1, p. 230–258, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1515/ntrev-2020-0020>>. Citado 5 vezes nas páginas 1, 2, 3, 4 e 7.

SHARMA, N. et al. Nanoinformatics and biomolecular nanomodeling: a novel move en route for effective cancer treatment. *Environmental Science and Pollution Research*, v. 27, 06 2020. Citado 3 vezes nas páginas 1, 2 e 3.

SINGHAL, A.; EBRAHIMI, F.; HOSSEINI, S. A comprehensive review on the modeling of smart piezoelectric structures. *Structural Engineering Mechanics*, v. 74, p. 611–633, 06 2020. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 4.

## APÊNDICE A – Recursos Ilustrativos

### Lista de ilustrações

Figura 1 – Tipos de nanoestruturas fundamentais: (a) nanofeixe (b) nanoplaca (c) nanobarra (d) nanoanel (e) nanoconcha de curva simples (f) nanoshell de curva dupla. (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020) . . . . .	2
Figura 2 – Tipos de nanoestruturas de carbono: (a) fulereno (b) nanotubo (c) folha de grafeno (d) estrutura de diamante. (CHANDEL; WANG; TALHA, 2020) . . . . .	2