UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

MODELAGEM DE NANOMÁQUINAS

Bolsista: Adjane Dalvana Sampaio Branches, FAPEAM

MANAUS
2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL
PIB – H – 008/2014
MODELAGEM DE NANOMÁQUINAS

Bolsista: Adjane Dalvana Sampaio Branches, FAPEAM
Orientador: Prof Dr Kelson Mota Teixeira de Oliveira

MANAUS
2015

RESUMO

Nos últimos anos, uma nova classe existente de máquinas têm sido pesquisada, em escala três vezes menor que as biomáquinas: as nanomáquinas ou máquinas moleculares (10^{-9} m). Especula-se que dentro de alguns anos, será tangível criar máquinas inteligentes, capazes de combater doenças e distúrbios no sítio celular exato de sua manifestação. A pesquisa atual nesse campo ainda encontra-se em fase inicial, com propostas apresentadas por abordagem puramente teórica. Isso porque os métodos experimentais usados na experimentação e criação de nanomáquinas são demorados e custosos, nesse contexto torna-se viável a utilização de programas gráficos de desenho molecular 3D no projeto teórico de nanoestruturas para acelerar o processo. Assim, esse projeto teve como objetivo a criação e modelagem teórica, via programas de modelagem molecular, de nanoestruturas que apresentem características de nanomáquinas com possíveis usos tecnológicos específicos. Dessas nanomáquinas destacam-se os nanoveículos, desenvolvidos pela equipe de James Tour da Universidade Rice (Texas- EUA), que ao serem expostos a altas temperaturas (170◦C - 200◦C) sobre uma superfície de ouro, realizam movimentos em duas dimensões. Além dos nanoveículos, há um giroscópio molecular, desenvolvido pela equipe de Garcia-Garibay (G-G Research Group) da Universidade da Califórnia, Los Angeles (EUA), o qual por meio de estímulo elétrico, magnético ou luminoso sofre rotação de 180º tanto no sentido horário quanto no sentido anti-horário.

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

ABSTRACT

In recent years, a new class of existing machines have been investigated, scale three times lower than the biomachines: molecular machines, or nanomachines (10^{-9} m). It is speculated that in a few years, will be tangible create intelligent machines capable of combating diseases and disorders in the exact cellular site of its manifestation. Current research in this field is still at an early stage, with proposals for purely theoretical approach. This is because the experimental methods used in experimentation and creation of nanomachines are time consuming and costly, in this context becomes feasible to use graphics 3D molecular design programs in nanostructures theoretical project to speed up the process. Therefore, this project aimed at the creation and theoretical modeling, via molecular modeling programs, nanostructures that have nanomachines characteristics with possible specific technological uses. These nanomachines stand out nanovehicles, developed by the team of James Tour of Rice University (Texas- USA), which when exposed to high temperatures (170◦C - 200◦C) on a gold surface, they realize movements in two dimensions. Besides nanovehicles, there is a molecular gyroscope developed by the team of Garcia Garibay (Research Group GG) of the University of California, Los Angeles (USA), which by means of electrical stimulation, magnetic or light undergoes a 180 ° rotation in either direction time and in a counterclockwise direction.

Keywords: Computational Modeling, Software Molecular Modeling Graphics, Nanomachines, Molecular Engineering, Computational Theoretical Chemistry.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO 6
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 7-8
3. JUSTIFICATIVA 9
4. OBJETIVOS.....10
   4.1. Geral.....10
   4.2. Específicos.....10
5. METODOLOGIA.....11
   5.1. Ferramental.....11
   5.2. Metodologia aplicada.....11
6. RESULTADOS.....12
   6.1. Nanoveículos.....12
      6.1.1. Nanocarro Molecular.....12-15
         6.1.1.1. Por que não utilizar ciclopentadienos? 15
      6.1.2. Nanocaminhão.....15-17
   6.2. Nanogiroscópio.....17-19
7. CONCLUSÕES.....20
8. REFERÊNCIAS 21-22
9. CRONOGRAMA.....23

1. Introdução

No mundo atual há grande proliferação de máquinas que vão desde as mais usuais como cafeteiras, máquinas de lavar, computadores e barbeadores, até as mais sofisticadas como radiotelescópios, colisores de partículas de alta energia e espectrômetros variados. São máquinas que pertencem ao mundo macroscópico, as quais executam algum tipo de tarefa quando lhe é fornecida energia. Além destas, existem outros tipos de máquina, com design completamente diferente, dentro de organismos biológicos. São biomáquinas que atuam no campo microscópico e são naturais de biossistemas, tendo seu expoente maior nas proteínas. A enzima F0F1-ATP-sintase é um exemplo tradicional de biomáquina, que apresenta um motor flagelar, formada por proteínas: converte a energia que vem da molécula trifostato de adenosina/ATP em movimento rotacional com quase 100% de eficiência (YASUDA *et al*, 1998).

Nos últimos anos uma nova classe de máquinas tem sido pesquisada, em escala três vezes menor que as biomáquinas: as nanomáquinas ou máquinas moleculares (da ordem de 10-9m) (RONCONI, 2011). Especula-se que em futuro próximo será possível criar nanomáquinas inteligentes capazes de combater doenças e distúrbios no sítio celular exato de sua manifestação, administrar drogas sem causar efeitos colaterais indesejáveis ou mesmo emular o funcionamento de máquinas comuns, mas em nanoescala, como a síntese/fabricação de novos materiais. O objetivo maior desta nova classe é a execução de tarefas na área médica, ambiental e farmacêutica. Nesse contexto essse projeto vai mostrar algumas nanomáquinas artificiais, que foram ou não sintetizadas.

2. Revisão bibliográfica

A pesquisa atual no campo da chamada Engenharia Molecular ainda está em fase inicial com muitas propostas apresentadas por abordagem puramente teórica. Entretanto, materiais avançados, com propriedades muitos específicas tem sido projetados para desempenhar funções inerentes a máquinas tradicionais. Nesse contexto, o grupo de pesquisa de Jean-Pierre Sauvage, da Universidade Louis Pasteur (França), tem desenvolvido nanomáquinas artificiais, baseados nas propriedades dos metais de transição que podem atuar como um músculo artificial, expandindo-se e contraindo-se de modo reversível (SAUVAGE *et al*, 2010). Em outra linha de aplicação, Tour e sua equipe da universidade Rice, têm desenvolvido nanocarros com a mecânica básica completa, a partir de nanoestruturas de carbono, capazes de se mover em cima de uma fina lâmina de ouro (TOUR e VIVES, 2009). Entre as muitas aplicações, os nanomotores tem sido pesquisados como um substituto sintético das biomáquinas/biomotores, e inspirados na forma e performance destes sistemas naturais (WANG, 2009). Contudo, a eficiência na conversão de energia destes nanomotores ainda é significativamente menor que a energia de transdução de biomotores, impelindo à pesquisa de novas composições de nanomotores (LAOCHAROENSUK *et a*l, 2008), e de motores de nanofios impelidos à diferença de potencial metálico (PAXTON *et al*, 2004; FOURNIER-BIDOZ *et al*, 2005). Outras máquinas têm sido projetadas, mas ainda estão em fase de pesquisa, como giroscópios moleculares (KARLEN *et al*, 2010), nanoválvulas, nanoportas e nanorrolhas (SILVEIRA et al, 2011). Este novo e fascinante mundo de engenharia molecular é a mais nova faceta da química e vai ditar os rumos da tecnologia neste século.

Com o advento das tecnologias, houve uma expansão e uma modificação na maneira de se fazer ciência, abrindo assim um leque de possibilidades para se atacar um problema(TRZESNIAK,2002). A implementação computacional de métodos teóricos somada a essa evolução possibilitou o tratamento de sistemas grandes e complexos. Com isso um grande passo foi dado nas mais diversas áreas da ciência. Atualmente é possível descrever sistemas moleculares relativamente complexos, o que não seria possível sem o auxílio desse método, com extrema precisão. Em química, mais especificamente em química teórica, esses métodos podem ser divididos em métodos clássicos ou métodos quânticos.

Uma das grandes virtudes atuais da química teórica é a de atuar como ferramenta de apoio na análise e interpretação de dados experimentais (MORGON, 2001), através de informações que muitas vezes não são possíveis de serem obtidas diretamente dos experimentos, ou na previsão de propriedades diversas. A química teórica, basicamente

compreendida em quântica (métodos *ab initio*, semi-empírico, funcional de densidade,) e clássica (mecânica dinâmica - determinístico e Montecarlo - estocástico;) tem-se tornado bastante popular nas últimas décadas (MORGON, 2001). Isso se deve ao fato de haver uma popularização de pacotes computacionais de química teórica, como por exemplo a série de programas Gaussian, além da implementação de algoritmos matemáticos e teóricos mais eficientes, e de equipamentos com melhor desempenho em processamento e transmissão de dados. Esses fatores influenciam principalmente na qualidade dos resultados calculados de propriedades moleculares (comparáveis à precisão química) e na possibilidade de estender os cálculos a sistemas de interesse químico (experimental).

Segundo MORGON graças a esses avanços observa-se uma forte interação entre químicos teóricos e experimentais, e com uma freqüência crescente o surgimento, em bancadas dos laboratórios, de estações de trabalho e computadores pessoais voltados exclusivamente para cálculos teóricos. Quando o foco se trata da físico-química, algumas aplicações rotineiras podem ser constatadas como por exemplo no cálculo de propriedades termodinâmicas de gases; na interpretação de espectro molecular; na determinação de propriedades estruturais (comprimentos e ângulos de ligação); na obtenção de diferenças de energias conformacionais e de barreiras de energias rotacionais; na caracterização de estados de transição e estimativa de constantes de velocidade.

Para que esses cálculos possam ser realizados existem alguns métodos conhecidos, mas ainda é muito difícil entender as informações geradas pelos cálculos teóricos e transmiti-la através de uma linguagem acessível para um químico experimental se torna um desafio. Em relação a este ponto a Teoria do Funcional de Densidade, que em inglês *Density Functional Theory*, DFT, leva uma grande vantagem (DUARTE, 2000). A descrição da energia eletrônica e das propriedades moleculares a partir de uma quantidade observável, a densidade eletrônica, permite uma comunicação mais objetiva entre teóricos e experimentais. De acordo com Kohn *et al*.(KOHN, 1996), *DFT* é uma linguagem conveniente e universal para a teoria de estrutura eletrônica, a qual ajuda substancialmente a unificar a química orgânica, a inorgânica, química de superfície e a ciência dos materiais.

3. Justificativa

Com a evolução de novos processos tecnológicos, a miniaturização alcançou patamares de nanoescala, tornando possível vislumbrar a criação de nanodispositivos capazes de converter energia e usá-la para os mais diversos fins. Chamadas também de máquinas moleculares, são geralmente mais eficientes que suas contrapartes em macroescala (MAVROIDIS et al, 2004). Com a crescente busca por projetos inovadores de nanoestruturas capazes de emular as máquinas existentes em macroescala, a engenharia molecular tornou-se, não apenas uma realidade, mas uma necessidade no terreno da inovação tecnológica.

Os métodos experimentais usados na experimentação e criação de nanomáquinas são demorados e custosos, mas têm se valido de programas gráficos de desenho molecular 3D no projeto teórico de nanoestruturas para acelerar o processo. Nesse sentido, este projeto visa criar os inputs básicos e modelar, quando for o caso, em abordagem teórica quanto-mecânica, algumas nanomáquinas que estão sendo atualmente pesquisadas e propor, se possível, pequenas melhorias.

4. Objetivos

4.1. Geral:

Criação e modelagem teórica, via programas de modelagem molecular, de nanoestruturas que apresentem características de nanomáquinas com possíveis usos tecnológicos específicos.

4.2. Específicos:

(a) Relacionar as principais nanomáquinas sintéticas já desenvolvidas e descrever o princípio que fundamenta seu funcionamento.

(b) Criar os inputs básicos das principais nanomáquinas, disponíveis para execução de cálculos quantum-mecânicos.

(c) Propor alterações, quando for possível, de algumas nanomáquinas desenhadas.

5. Metodologia

5.1. Ferramental

Sinopse: A metodologia a ser aplicada consistiu-se em uma abordagem teórica-computacional, a partir do uso de softwares gráficos de modelagem molecular com o objetivo de criar os inputs básicos necessários a, quando possível, cálculos mecânico-quânticos, aplicados às nanoestruturas.

Software

- Pacote Gaussian 03W™
- Visualizador gráfico Gauss03 View™
- Hyperchem 7.4™
- Interface gráfica de modelagem molecular ACD/LABS™

Hardware

- Microcomputadores Intel™ Quadicore, com plataforma Windows e Linux Debian, v. 5.0 RAM, existentes no Laboratório de Química Teórica e Computacional.

5.2. Metodologia Aplicada

- Foi realizado um pequeno levantamento bibliográfico sobre as principais nanoestruturas utilizadas como nanomáquinas e seus princípios fundamentais de funcionamento.
- Estudou-se a correlação entre os princípios fundamentais de funcionamento e a estrutura molecular da nanomáquina.
- Desenhou-se nanoestruturas básicas, já levantadas na pesquisa bibliográfica, necessárias para construir um nanocarro, um nanocaminhão e nanogiroscópio.

6. Resultados

Das nanomáquinas existentes, selecionou-se quatro: três formas diferentes de nanoveículos e um nanogiroscópio. Inicialmente, modelou-se as estruturas no programa de modelagem molecular Hyperchem 7.4™. Posteriormente, criou-se os inputs com os quais seria feita a realização do cálculo das propriedades energéticas, no Gauss03 View™.

6.1. Nanoveículos:

Usando alguns análogos estratégicos de design de componentes de veículos de transporte macroscópicos (por exemplo, carros, caminhões, trens), a equipe de James Tour, da Universidade Rice do Texas (EUA), montou e sintetizou veículos a nível molecular: nanocarros e nanocaminhões.

6.1.1. Nanocarro molecular

As rodas são formadas por moléculas de carbono com 60 átomos (**Figura 1**) desse elemento, lembrando uma bola de futebol. O chassi é formado por moléculas planas em forma de anéis. Os eixos são unidos às rodas por meio de ligações triplas de carbono que, por sua vez, são ligados ao chassi, estas ligações permitem que ocorra o giro do eixo.

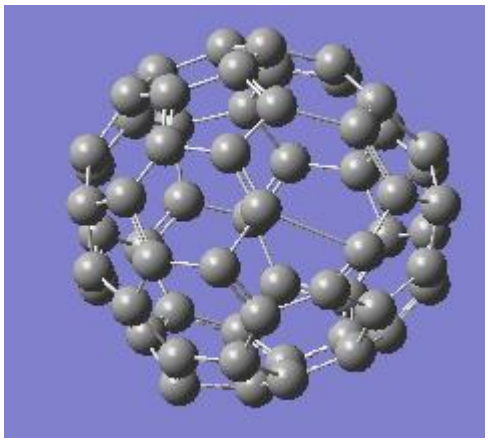

Figura 1: Carbono fulereno, $C_{60.}$ Modelagem feita a partir do programa Gaussian 03W™.

O movimento do nanocarro (**Figura 2a**) sobre uma superfície de ouro (Au) foi monitorado pela equipe de Tour através de um microscópio especial que gera imagens de superfícies com resolução atômica, esse microscópio é chamado de varredura por tunelamento. Os cientistas observaram que mesmo após uma temperatura muito elevada (170°C) os nanocarros sintetizados permaneceram estacionários sobre a superfície, somente em aproximadamente

225°C foram observados os movimentos, e essa foi a temperatura máxima necessária para que os nanocarros apresentassem movimentos em duas direções (**Figura 2b**).

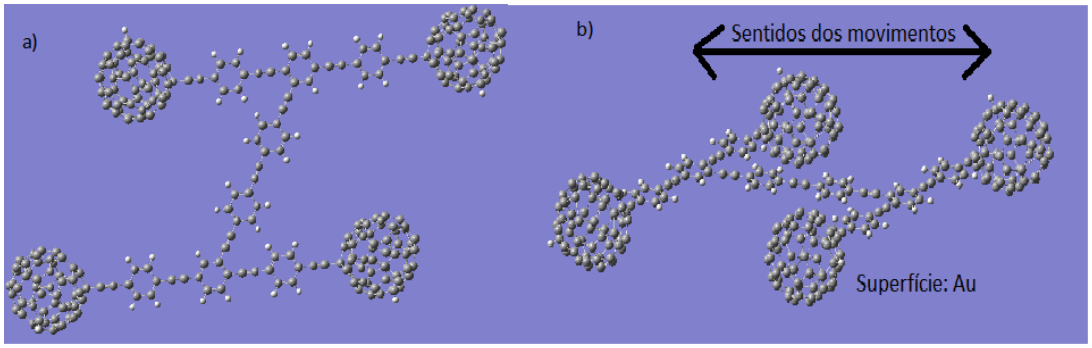

Figura 2: a) Nanocarro molecular, modelagem deste trabalho feita a partir do programa Gaussian 03W ™.
b) Movimentos realizados sobre uma superfície de ouro (Au) quando elevada a temperatura a aproximadamente 225°C.

Na Tabela 1 encontram-se algumas informações do nanocarro deste trabalho. Dados obtidos através do input criado no Gauss 03 View™ .

Energia Eletrônica	-11826,30693400
Tipo de Cálculo	SP
Método	RB3LYP
Conjunto de Bases	6-31G
Momento Dipolo	3,9206 D
Quantidade de Átomos	344 (310 Carbonos e 34 Hidrogênios)
Tempo de Trabalho da CPU	0 dias 5 horas 52 minutos

Tabela 1: Alguns dados do nanocarro utilizado nesse trabalho

O ângulo da ligação (**Figura 3**) simples entre carbono-fulereno(C_{60}), além da ligação tripla ao lado da ligação C-C_{60} permite que o giro ocorra, nessas condições específicas citadas anteriormente.

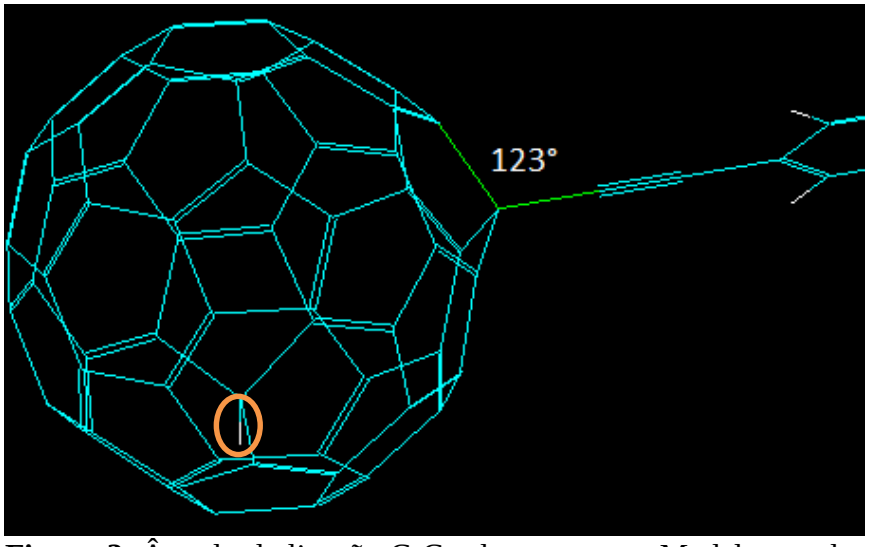

Figura 3: Ângulo da ligação C-C_{60} do nanocarro. Modelagem deste trabalho feita a partir do programa Hyperchem 7.4™. Note que ligado ao fulereno há um hidrogênio (círculo laranja), isso porque para que o chassi fosse ligado ao C60, houve a quebra de uma ligação, então o hidrogênio se faz necessário para completar a valência do respectivo carbono a ele ligado.

Ao realizar o monitoramento do nanocarro, a equipe de James Tour pôde observar uma outra estrutura, uma variação de nanoveículo (**Figura 4**), que assim como o nanocarro também apresentava movimento rotacional a elevada temperatura. Porém essa nova estrutura movimentava-se em movimentos circulares e não para frente como o nanocarro.

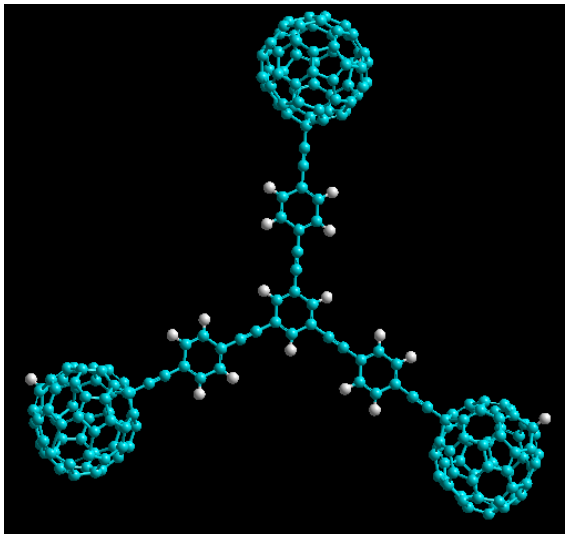

Figura 4: Variação de nanocarro, modelagem deste trabalho feita a partir do programa Hyperchem 7.5™. Diferente do nanocarro, que possui quatro fulerenos como roda, essa variação possui apenas três, o que justifica seu movimento circular.

Na Tabela 2 encontram-se algumas informações da variação de nanocarro demonstrada acima. Dados obtidos através do input gerado no Gauss 03 View™ .

Energia Eletrônica	-8236,85331486
Tipo de Cálculo	SP
Método	RB3LYP
Conjunto de Bases	6-31G
Momento Dipolo	2,5109 D
Quantidade de átomos	234 (216 Carbonos e 18 Hidrogênios)
Tempo de Trabalho da CPU	0 dias 3 horas 19 minutos

Tabela 2: Algumas informações a respeito da variação de nanocarro utilizada nesse trabalho.

6.1.1.1. Por que não utilizar ciclopentadienos?

Ao observar as estruturas acima, percebe-se majoritariamente a presença dos benzenos (compostos ciclotrienos aromáticos de fórmula molecular C_6H_6). Ao propor-se a utilização de ciclopentadienos (C_5H_4) nas estruturas (**Figura 5**) percebeu-se o motivo de não ser favorável utilizá-los: Além de não serem moléculas planares, -o que faria com que a estrutura não ficasse planar- não possuem aromaticidade, o que tornaria a molécula menos estável energeticamente.

Em contraposição, a aromaticidade do benzeno o torna uma substância particularmente estável, visto que sua energia de ressonância é extraordinariamente alta (36kcal/mol ou 151 kj/mol), isso faz com que seja preterível e muito mais favorável para a estrutura utilizar-se benzenos. (BRUICE, 2006)

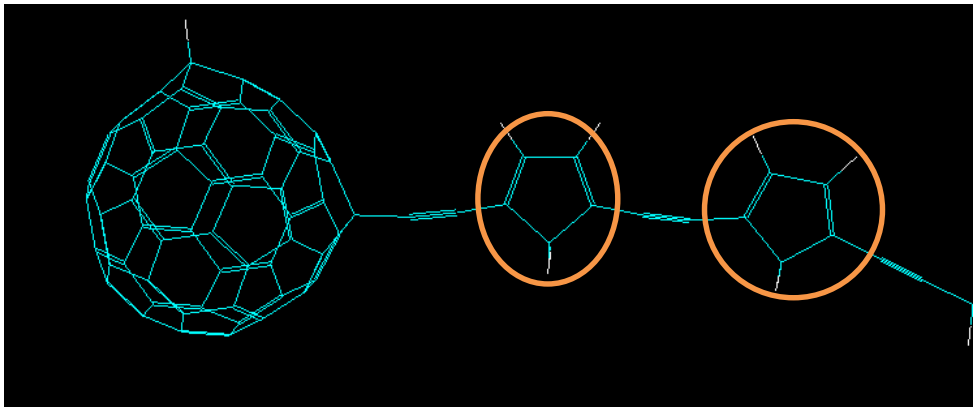

Figura 5: Ao inserir ciclopentadienos no lugar dos benzenos a estrutura começa a se curvar, o que não acontece quando se utiliza benzenos.

6.1.2. Nanocaminhão

Uma outra forma de nanoveículo, que também foi idealizada pela equipe de James Tour, é o nanocaminhão que difere do nanocarro no quesito constituição do seu chassi (**Figura 6**) e movimentos (**figura 7**) que realiza.

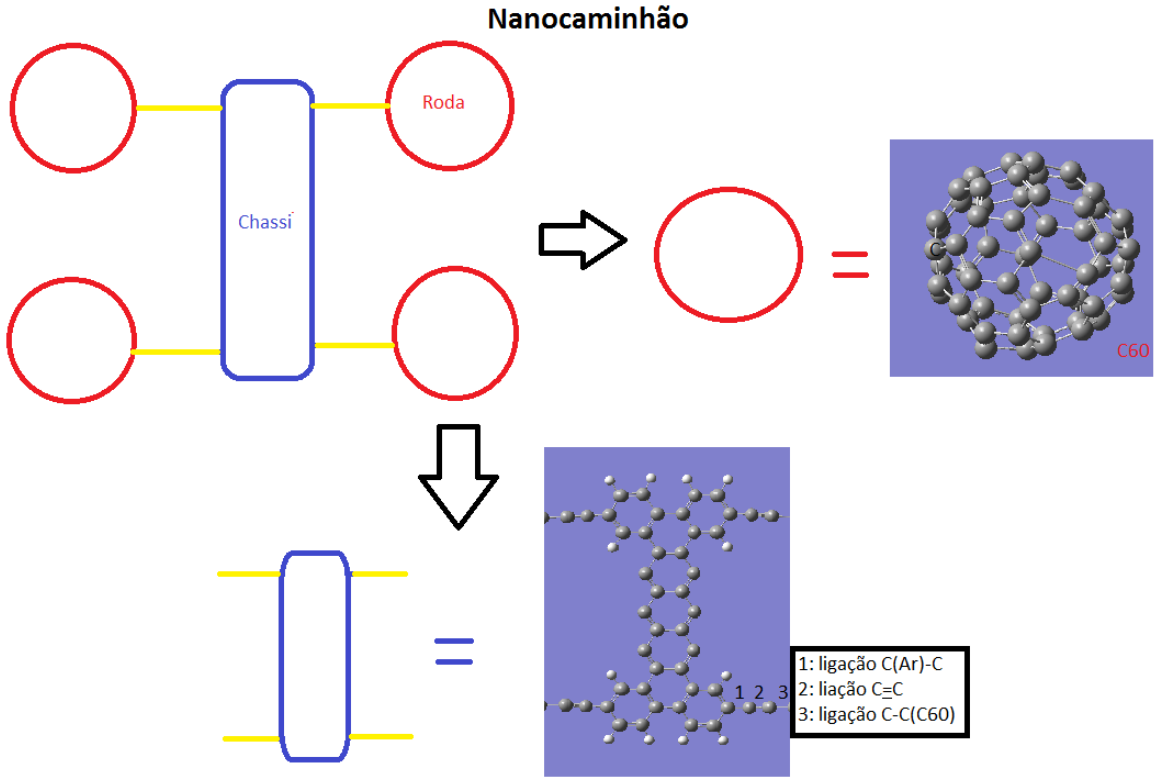

Figura 6: Elementos constituintes do nanocaminhão. Nos quadrados azuis, alguns fragmentos do mesmo (modelagem desse trabalho feito a partir do Gaussian 03W™).

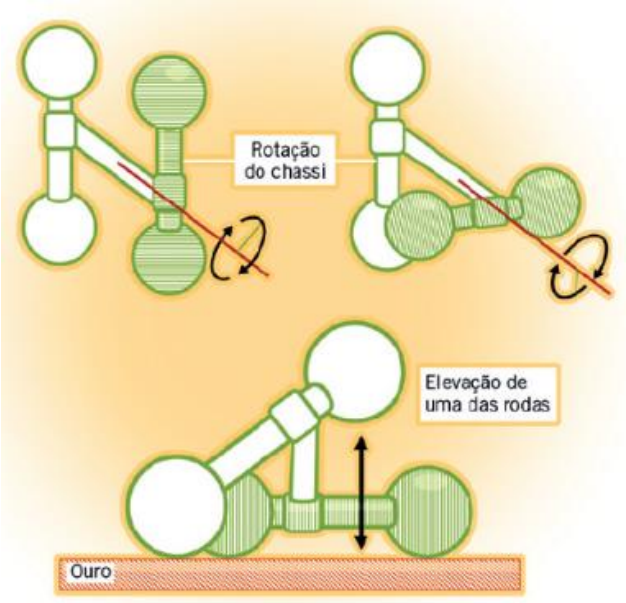

Figura 7: Movimentos do nanocaminhão.
FONTE: (RONCONI, 2011)

Na Tabela 3 encontram-se alguns dados a respeito do nanocaminhão utilizado nesse trabalho.

Energia Eletrônica	6,92642691
Tipo de Cálculo	FOPT
Método	RAM1
Conjunto de Bases	ZDO
Momento Dipolo	3,4394 D
Quantidade de átomos	302 (286 Carbonos e 16 Hidrogênios)
Tempo de Trabalho da CPU	0 dias 17 horas 7 minutos

Tabela 3: Alguns dados do nanocaminhão utilizado nesse trabalho

6.2. Nanogiroscópio:

Criado originalmente por Jean Bernard Léon Foucault, o giroscópio tem muitas utilidades como por exemplo atuar na inclinação dos navios quando o clima está tempestuoso e ser utilizado na navegação como bússola. Pilotos automáticos também usam giroscópios para dirigir aviões ou mísseis sem ser necessário o monitoramento de uma pessoa.(ENCICLOPÉDIA ESCOLAR BRITÂNICA, 2015)

Um giroscópio mecânico (**Figura 8)** é formado por um eixo e uma roda (rotor) inserida no interior de uma segunda roda perpendicular. Quando é aplicada uma força ao rotor, o giroscópio começa a girar na direção do eixo.

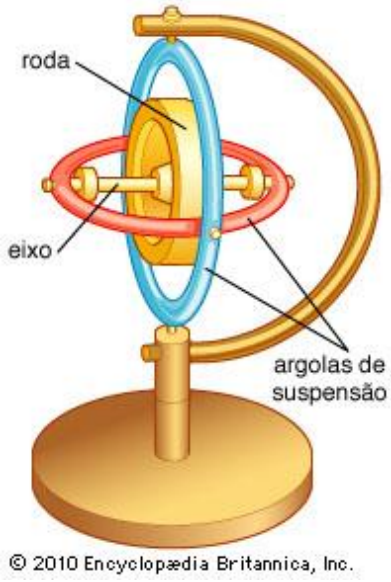

Figura 8: Giroscópio mecânico.
FONTE: Retirado de <http://escola.britannica.com.br/assembly/134439/Um-giroscopio-mecanico-consiste-em-uma-roda-montada-em-um>. Acesso em: 29 de julho de 2015.

No caso do giroscópio molecular (**Figura 9)**, o giro ocorre devido às ligações entre o carbono apresentarem baixa barreira energética para a rotação, por meio de estímulo elétrico, magnético ou luminoso.

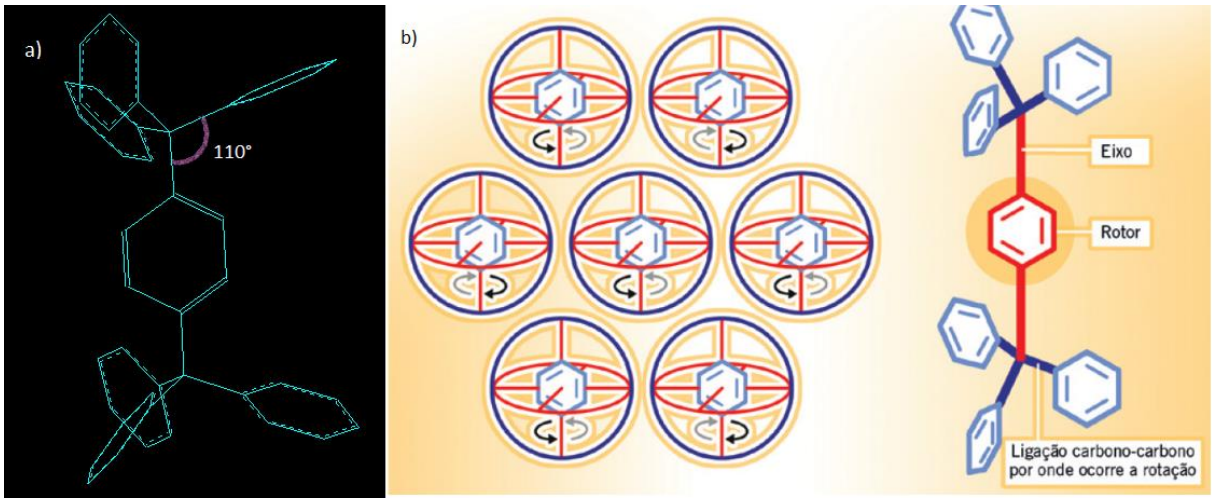

Figura 9: a) Nanogiroscópio utilizado nesse trabalho, modelagem feita no programaHyperchem 7.4™.
b) Movimentos que o nanogiroscópio executa. FONTE: (RONCONI, 2011)

Na Tabela 4 encontram-se alguns dados do nanogiroscópio utilizado nesse trabalho obtidos através do input gerado no Gauss 03 View™.

Energia Eletrônica	-1673,45550123
Tipo de Cálculo	SP
Método	RB3LYP
Conjunto de Bases	6-31G
Momento Dipolo	0,5451 D
Quantidade de átomos	78 (44 Carbonos e 34 Hidrogênios)
Tempo de Trabalho da CPU	0 dias 0 horas 19 minutos

Tabela 4: Alguns dados do nanogiroscópio utilizado nesse trabalho.

7. Conclusões

Com esse projeto foi possível verificar o porquê da não utilização de benzenos nas nanomáquinas selecionadas através da utilização de programas de visualização gráfica, bem como suas propriedades energéticas. Embora sejam apenas dados de cunho teórico-computacional, podem servir como campo de pesquisa da orgânica experimental.

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

8. Referências

- RONCONI, C. M. *Nanomáquinas: Químicos como arquitetos do mundo molecular. Ciência Hoje*, 48 (2011) 284.
- SAUVAGE, Jean-Pierre; DUROT, S.; REVIRIEGO, F. *Copper-complexed catenanes and rotaxanes in motion: 15 years of molecular machine*. *Dalton Transactions*, 39 (2010) 510-557.
- VIVES, G.; TOUR, James M. *Synthesis of Single-Molecule Nanocars*. *Accounts of Chemical Research*, 42 (2009) 473.
- KARLEN, S.S.; REYES, H.; TAYLOR, R.E.; KHAN, S.I.; HAWTHORNE, M.F.; GARCIA-GARIBAY, M.A. *Symmetry and dynamics of molecular rotors in amphidynamic molecular crystals*. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*, 107 (2010) 914-973.
- SILVEIRA, G.Q.; VARGAS, M.D.; RONCONI, C.M. *Nanoreservoir operated by ferrocenyl linker oxidation with molecular oxygen*. *Journal of Material Chemistry,* 21 (2011) 6-34.
- WANG, J.; *Can man-made nanomachines compete with natural biomotors? ACS Nano* 3 (2009) 4-9.
- LAOCHAROENSUK, R.; BURDICK, J.; WANG, J. *CNT-Induced Acceleration of Catalytic Nanomotors*. *ACS Nano,* 2 (2008) 1069–1075.
- PAXTON, W.F.; KISTLER, K.C.; OLMEDA, C.C.; SEN, A.; ST ANGELO, S.K.; CAO, Y.Y.; MALLOUK, T.E.; LAMMERT, P.E.; CRESPI, V.H. *Catalytic Nanomotors: Autonomous Movement of Striped Nanorods*. *J. Am. Chem. Soc.* 126 (2004)13424–13431.
- FOURNIER-BIDOZ, S.; ARSENAULT, A.C.; MANNERS, I.; OZIN, G.A. *Synthetic Self-Propelled Nanorotors. Chem. Commun.* 4 (2005) 441–443.
- YASUDA, R.; NOJI, H.; KINOSITA, K JR.; YOSHIDA, M. *F1-ATPase is a highly efficient molecular motor that rotates with discrete 120 degree steps. Cell* 93 (1998) 1117–1124.
- Mavroidis, C.; Dubey, A.; Yarmush, M.L. *Molecular Machines. Annu. Rev. Biomed. Eng*. 6 (2004)10.1–10.33
- MORGON, Nelson H.; *Computação Em Química Teórica: Informações Técnicas.* Quím. Nova vol.24 no.5 São Paulo Sept./Oct. 2001
- TRZESNIAK, D. Rodrigo Ferreira; *Modelagem Quântica de Inibidores Enzimáticos;* Tese; Orientador: Prof. Dr. Sylvio R. A Canuto. USP (*2002) 3-1*.
- OLIVEIRA, M.A.; PERNAUT, J-M.; DUARTE, H. A.; DE ALMEIDA, W. B. (2000) J.Phys. Chem. A 104:8256
- KOHN, W.; SHAM, L. J. (1965) Phys. Rev. 140:1133
- *giroscópio*. In Britannica Escola Online. *Enciclopédia Escolar Britannica*, 2015. Web,2015. Disponível em: <http://escola.britannica.com.br/article/481438/giroscopio>. Acesso em: 29 de julho de 2015.

- *giroscópio*. 1 Ilust., color. In *Britannica Escola Online*. Web, 2015. Disponível em:<http://escola.britannica.com.br/assembly/134439/Um-giroscopio-mecanico-consiste-em-uma-roda-montada-em-um>. Acesso em: 29 de julho de2015.
- BRUICE, P. Y. *Química Orgânica.* 4ª ed., vol. 1 e vol. 2. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.

9. Cronograma

Nº	Descrição	Ago 2014	Set	Out	Nov	Dez	Jan 2015	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul
1	Levantamento bibliográfico e estudo dos fundamentos de Química Teórica	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**
2	Fundamentação e classificação das principais nanomáquinas	**R**	**R**	**R**	**R**	**R**							
3	Desenho e modelagem de quatro nanomáquinas			**R**	**R**	**R**	**R**						
4	Criação de inputs a partir das moléculas desenhadas				**R**	**R**	**R**	**R**					
5	Cálculo de propriedades energéticas						**R**	**R**	**R**	**R**			
6	Proposta de alteração em algumas nanomáquinas							**R**	**R**	**R**	**R**		
7	Discussão de resultados								**R**	**R**	**R**	**R**	
8	Elaboração do Resumo e Relatório Final											**R**	**R**
9	Preparação da Apresentação Final para o Congresso												**R**