



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

ESTUDO TEÓRICO DE FAIXAS DE MÖBIUS MOLECULARES

MURILO ASSUNÇÃO DO NASCIMENTO

RECIFE

2023

MURILO ASSUNÇÃO DO NASCIMENTO

ESTUDO TEÓRICO DE FAIXAS DE MÖBIUS MOLECULARES

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de Licenciatura em Química do UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO (UFRPE) - Campus RECIFE como requisito parcial para obtenção do Título de Licenciado em Química.

Orientador: Prof. Dr. Cristiano Costa Bastos.

Coorientador: Dr. Luiz Carlos Barbosa da Silva

RECIFE

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal Rural de Pernambuco
Sistema Integrado de Bibliotecas
Gerada automaticamente, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- N244e Nascimento, Murilo Assunção do
ESTUDO TEÓRICO DE FAIXAS DE MÖBIUS MOLECULARES / Murilo Assunção do Nascimento. -
2023.
64 f. : il.
- Orientador: Cristiano Costa Bastos.
Coorientador: Luiz Carlos Barbosa da Silva.
Inclui referências.
- Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade Federal Rural de Pernambuco,
Licenciatura em Química, Recife, 2023.
1. Mecânica quântica. 2. Geometria diferencial. 3. Faixa de Möbius. I. Bastos, Cristiano Costa, orient. II.
Silva, Luiz Carlos Barbosa da, coorient. III. Título

MURILO ASSUNÇÃO DO NASCIMENTO

**ESTUDO TEÓRICO DE FAIXAS DE MÖBIUS
MOLECULARES**

Monografia apresentada ao Curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal Rural de Pernambuco, como requisito para obtenção do título de Licenciado em Química.

Aprovado em: 18 de setembro de 2023.

Banca Examinadora

Cristiano Costa Bastos– Orientador
Universidade Federal Rural De Pernambuco

Luiz Carlos Barbosa da Silva – Co-Orientador
Instituto Weizmann de Ciências

Gilson Simões Ferreira Júnior – 1º avaliador
Universidade Federal Rural De Pernambuco

Ronaldo Nascimento de Oliveira– 2º avaliador
Universidade Federal Rural De Pernambuco

RECIFE
2023

Dedico este trabalho aos meus familiares, por
todo o esforço e apoio para que eu pudesse
realizar essa conquista.

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Cristiano Bastos pela orientação, incentivo e pelas conversas sobre política, cultura e basquete, e conhecimentos compartilhados em laboratório;

Ao Prof. Luiz pela coorientação, pela ajuda no campo da matemática e programação durante todo o processo da pesquisa, e pela paciência;

Aos professores e funcionários da UFRPE, que diretamente ou indiretamente contribuíram, de alguma forma, para a realização deste trabalho e para a minha formação;

Aos colegas do Laboratório Nachbin-Pauling, por compartilharem e auxiliarem em todos os momentos da construção deste trabalho, pelo companheirismo e troca de experiências e por toda a amizade;

À minha mãe, minha irmã e toda família que me apoiou desde a minha infância e por toda a graduação;

À Nathália Ferino, pelo amor, compreensão e paciência, e por estar sempre ao meu ao longo de todo o período de tempo em que me dediquei a este trabalho;

E por fim, quero agradecer ao Museu Espaço Ciência e ao apoio da Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE), pelo período em que fui monitor e pude dar os meus primeiros passos e me desenvolver na minha caminhada científica.

"The Infinite is only a manner of speaking."
- Carl Friedrich Gauss

Resumo

Diversas aplicações matemáticas têm sido estudadas nos mais variados contextos. Um desses casos é a aplicação da geometria diferencial a sistemas moleculares. O estudo de nanoestruturas e suas aplicações tem ganhado cada vez mais espaço. Neste trabalho realizamos a aplicação do formalismo de Da Costa, na qual ao aplicar um potencial confinante dependente da curvatura média e da curvatura gaussiana da estrutura estudada restringimos o movimento da partícula na superfície, em faixas de Möbius para estudar a variação desta nas propriedades eletrônicas e estruturais a partir de variações geométricas, e compara-las com os resultados computacionais. Obtivemos que à medida em que o tamanho de uma faixa diminui, maiores serão as variações nas propriedades para menor estabilidade, menor condutividade e menor reatividade quanto maior for o número de torções.

Palavras-chave: Mecânica quântica; Geometria diferencial; Faixa de Möbius.

Abstract

Several mathematical applications have been studied in many contexts. One of these cases is the application of differential geometry to molecular systems. The study of nanostructures and their use has gained more and more space. In this work, we apply Da Costa's formalism, in which by applying a confining potential dependent on the mean curvature and Gaussian curvature of the structure studied, we restrict the movement of the particle on the surface, to the Möbius strip to study the variation of electronic and structural properties based on geometric variations and compare them with computational results. We found that as the size of a strip decreases, the greater the variations in properties will be for lower stability, lower conductivity, and lower reactivity, the greater the number of twists.

Keywords: Quantum mechanics; Differential geometry; Möbius strip.

Lista de Figuras

1	Exemplos de nanoestruturas; (a) Nanocone, (b) Fulereo e (c) Nanotubo.	13
2	Exemplo de uma Faixa de Möbius com uma torção.	14
3	Síntese da primeira faixa de Möbius molecular.	15
4	Rotas sintéticas para estruturas de cicloparafenileno (CPP) do tipo faixa de Möbius.	15
5	Estrutura de Möbius de Carbono incorporadas com átomos de Boro e Nitrogênio.	16
6	Faixas de Möbius para diferentes valores de n.	28
7	Curvaturas Médias para (a) n=1 (b) n=2 (c) n=3.	31
8	Curvaturas Médias para n=1 com o aumento do tamanho das faixas.	32
9	Curvaturas Médias para n=2 com o aumento do tamanho das faixas.	32
10	Curvaturas Médias para n=3 com o aumento do tamanho das faixas.	33
11	Curvaturas Gaussianas para (a) n=1 (b) n=2 (c) n=3.	33
12	Curvaturas Gaussianas para n=1 com o aumento do tamanho das faixas.	34
13	Curvaturas Gaussianas para n=2 com o aumento do tamanho das faixas.	34
14	Curvaturas Gaussianas para n=3 com o aumento do tamanho das faixas.	34
15	Potencial da Costa(V_{dcs}) para (a) n=1 (b) n=2 (c) n=3.	36
16	Potencial da Costa(V_{dcs}) para n=1 com o aumento do tamanho das faixas.	36
17	Potencial da Costa(V_{dcs}) para n=2 com o aumento do tamanho das faixas.	37
18	Potencial da Costa(V_{dcs}) para n=3 com o aumento do tamanho das faixas.	37
19	Faixas (a)b _{20n0} , (b)b _{20n1} , (c)b _{20n2} , (d)b _{60n0} , (e)b _{60n1} e (f)b _{60n2}	38
20	C_i , C_e e H.	39
21	Definições de dentro e fora da torção e átomos internos e externos.	39
22	Comportamento dos n ₀	40

23	Energia como função do número de torções(n) separados por tamanho de faixa.	41
24	Regressão linear para as faixas b20, b30, b40, b50 e b60.	41
25	Coeficiente β como função do Número de anéis de benzeno (b).	42
26	ΔE_n como função do Número de anéis de benzeno (b).	43
27	Faixas (a)b20n0, (b)b20n1, (c)b20n2, (d)b60n0, (e)b60n1 e (f)b60n2.	44
28	ΔHF como função do Número de anéis de benzeno (b).	45
29	Cargas de Mulliken para as faixas (a)n0, (b)n1, (c)n2, (d)n3 , (e)n4 e (f)n5.	46
30	HOMO.	47
31	LUMO.	48
32	Gap HOMO-LUMO.	49
33	Dureza absoluta como função do número de torções.	50
34	Eletroafinidade como função do número de torções.	51
35	Eletronegatividade como função do Número de torções.	52
36	Densidade de estados para o b20(coluna da esquerda), b40(coluna do meio) e b60(coluna da direita).	53
37	Moléculas com duas torções sem simetria para a)b20, b)b30, c)b40, d)b50 e e)b60.	54
38	Cargas para as moléculas com duas torções com e sem simetria.	55
39	Comparação das Densidade de Estados para as moléculas com (direita) e sem simetria (esquerda) a)b20, b)b40 e c)b60.	56
40	Substituição na molécula por Cl na posição a)Dentro da torção na parte interna, b)Dentro da torção na parte externa e c)Fora da torção.	57
41	Comparação entre os Gaps HOMO-LUMO de substituintes a)Fortemente Ativadores e Desativadores e b)Fracamente Ativadores e Desativadores.	60

Lista de Tabelas

1	Diferença entre as energias B3LYP e HF pelo tamanho da faixa	45
2	Energias para os sistemas com e sem simetria	54
3	Energias das Substituições por NH ₂ , CH ₃ , Cl e NO ₂ nas regiões internas, externas e fora da torção	59

Sumário

1	Introdução	13
2	Objetivos	18
2.1	Geral	18
2.2	Específicos	18
3	Fundamentação Teórica	19
3.1	Superfície	19
3.2	Mecânica Quântica	21
3.3	Simulações Computacionais	22
3.3.1	Teoria do Funcional da Densidade (DFT)	22
3.3.2	Programa Gaussian	24
3.3.3	Propriedades métodos computacionais	25
4	Metodologia	26
4.1	Curvaturas e Função de onda	26
4.2	Métodos Computacionais	26
5	Resultados obtidos	28
5.1	Função de onda e Curvaturas	28
5.1.1	Parametrização da fita de Möbius e Curvaturas	28
5.1.2	A equação de Schrödinger, o Operador Laplace-Beltrami(Δ_{LB}) e o Potencial da Costa(V_{DC})	35
5.2	Resultados Computacionais	38
5.2.1	Energia	40
5.2.2	Densidade de carga	45
5.2.3	HOMO-LUMO	47
5.2.4	Dureza absoluta (η), Eletroafinidade (ω) e Eletronegati- vidade (χ)	49
5.2.5	Densidade de Estados	52
5.2.6	Simetrias	54
5.2.7	Substituições	57
	Referências	63

1 Introdução

Na literatura podemos encontrar diversos casos em que a mudança de geometria altera as propriedades de materiais, como no estudo de D'yachkova e D'yachkova (2021), onde ao aplicarmos qualquer tipo de deformação (tensão, compressão ou torção) em nanotubos quase metálicos e possível induzir um alargamento acentuado do intervalo de bandas de valência e condução, e obter semicondutores. A pesquisa desse tipo de sistema nos ajuda a entender aspectos matemáticos que podem influenciar nas questões físico-químicas da matéria. Desta forma, podemos encontrar diversas abordagens que relacionam estes problemas matemáticos com sistemas moleculares. Estudos como os de De Witt nos anos 1950, que buscava descrever o problema do confinamento em um espaço curvo, e de Jensen e Koppe e o de Da Costa, nas décadas de 1970 e 1980, respectivamente, demonstraram através da aplicação de aspectos da geometria diferencial na mecânica quântica descrita por Schrödinger(1926) que existia um potencial induzido pela geometria que atuava sobre o sistema (SILVA; BASTOS; RIBEIRO, 2017).

E, desde então, várias pesquisas nesta área de atuação foram desenvolvidas, servindo inclusive para determinar propriedades associadas a compostos com geometrias não triviais. Trabalhos como estes auxiliam nos estudos das nanoestruturas, que são aplicáveis desde dispositivos eletrônicos à biologia molecular, como por exemplo os nanotubos, nanocones e fulerenos (Figura 1), quanto a sua complexa gama de propriedades físico-químicas, além de outros compostos derivados de modificações por meio de deformações e de dopagem(SILVA FILHO, 2018).

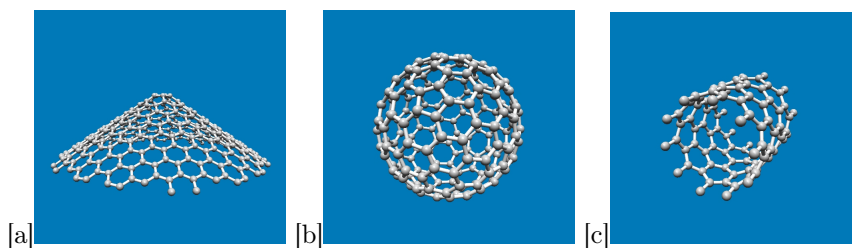


Figura 1: Exemplos de nanoestruturas; (a) Nanocone, (b) Fulereo e (c) Nanotubo.
Fonte: O autor.

Alguns exemplos desse tipo de pesquisa são os trabalhos de Scardicchio (2002) que descreve a dinâmica quântica de uma partícula confinada em um círculo, Kowalski e Rembielinski (2013), que trata da dinâmica de uma partícula em

um cone, e Jahangiri e Panahi (2016), que aborda um tratamento da mecânica quântica para uma partícula confinada em uma esfera bidimensional. Além dessas estruturas apresentadas, outra superfície que vem chamando atenção é a faixa de Möbius, como podemos ver na Figura 2. Podemos dizer que a faixa de Möbius é um dos ícones da matemática que foram absorvidos pela cultura, inspirando artistas, como, por exemplo, a obra *Möbius Strip II*, de 1963 da artista M.C. Escher (Boal, F.H. et al, 1981), engenheiros e, mais recentemente, foram calculados os autoestados para uma partícula confinada numa faixa de Möbius a fim de antecipar os efeitos associados à sua curvatura (STAROSTIN, HEIJDEN, 2007).

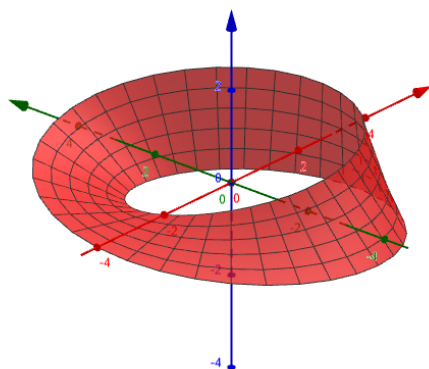


Figura 2: Exemplo de uma Faixa de Möbius com uma torção.
Fonte: O autor.

Foi baseada nessa estrutura similar ao cilindro com uma torção de 180° em torno do seu eixo longo, que Walba, Richards e Haltiwanger (1982) publicaram a primeira síntese total de uma faixa de Möbius molecular, por meio da ciclização altamente diluída tris-(tetrahydroxymethylethylene) (THYME) diol ditosylate, conforme demonstrado na Figura 3, onde se forma a faixa com uma torção e o seu isômero cilíndrico. Uma nova estrutura que apresenta diversas propriedades de simetria abriu caminho para outras propostas de sínteses de estruturas topologicamente interessantes, como, por exemplo, cilindros com um maior número de torções.

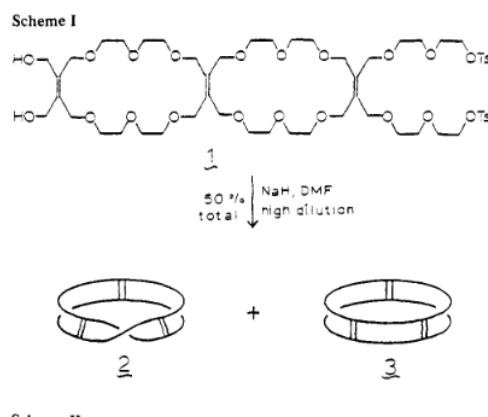


Figura 3: Síntese da primeira faixa de Möbius molecular.
Fonte: Walba, Richards e Haltiwanger (1982).

Mais recentemente, outros trabalhos foram desenvolvidos a fim de propor rotas sintéticas para estruturas do tipo Möbius, como, a síntese de um cicloparafenileno (CPP) em forma de cinto e em forma de Möbius (Figura 4), que possui quiralidade estável e é isolado com alta pureza enantiomérica, via ciclotrimerizações intramoleculares catalisadas por ródio de alto rendimento de um dodecaino cíclico e um pentadecaino, respectivamente. Este CPP em forma de Möbius possui quiralidade estável e é isolado com alta pureza enantiomérica (NISHIGAKI et. al., 2019).

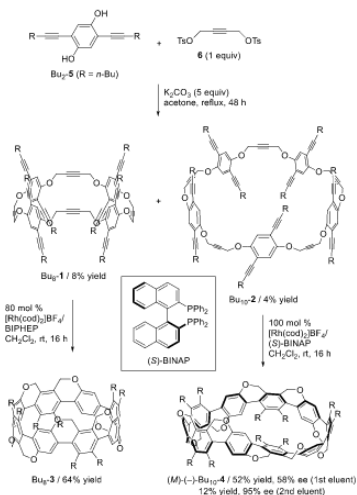


Figura 4: Rotas sintéticas para estruturas de cicloparafenileno (CPP) do tipo faixa de Möbius.
Fonte: NISHIGAKI et. al. (2019).

À medida em que esses estudos experimentais foram avançando, também se fez necessário a realização de estudos teóricos que abordem essa estrutura. Podemos citar, dentre os diversos trabalhos recentes, o de Chung e Chai (2019),

que empregou a Teoria do Funcional de Densidade de Ocupação Termicamente Assistida (TAO-DFT) para prever as propriedades dos cicloalcanos com a geometria do tipo faixa de Möbius, variando o número de anéis de benzeno, e comparar com as propriedades dos cicloalcanos e alcenos com o mesmo número de benzenos. Kalvoda, Krejcirik e Zahradova (2020) investigaram a influência no operador Laplace- Beltrami da faixa de Möbius quando o limite da largura da faixa tende a zero. Ahmed, Islam e Ahmed (2023) investigaram uma estrutura de Möbius de Carbono com átomos de Boro e Nitrogênio incorporados (Figura 5), para verificar o seu efeito nas propriedades geométricas, óticas e eletrônicas, aplicando DFT para investigar as propriedades estruturais, vibracionais, eletrônicas, óticas das estruturas utilizando o B3LYP com a base 6–31G(d), onde a estruturas apresentaram mudança de semicondutor para isolante quanto menor a concentração de carbono na estrutura e maior estabilidade, enquanto apresenta uma maior reatividade quanto maior o número de carbonos presentes na faixa.

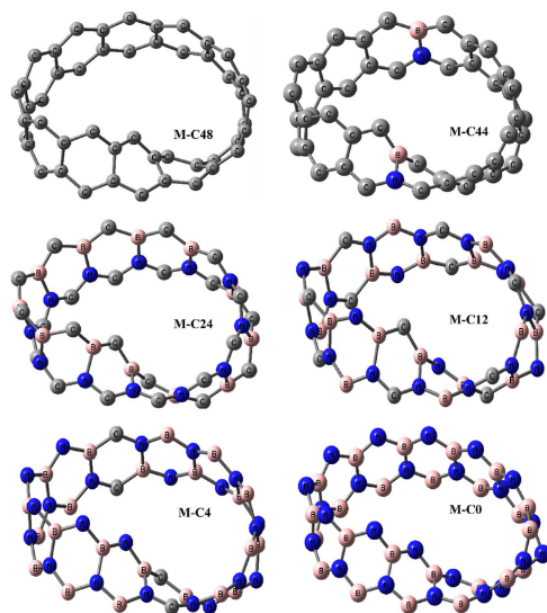


Figura 5: Estrutura de Möbius de Carbono incorporadas com átomos de Boro e Nitrogênio.
 Fonte: AHMED, ISLAM e AHMED (2023).

Estudos dessa natureza aplicados a superfícies como a faixa de Möbius nos ajudam a entender como as variações das propriedades geométricas, como a sua curvatura, podem alterar a química associada a materiais que se comportam como uma superfície desse tipo. Sendo assim, buscamos responder às seguintes questões: Existem propriedades que são invariantes independentemente do nú-

mero de torções numa faixa de Möbius? Como as propriedades físico-químicas (eletrônicas e estruturais) das faixas de Möbius se comportam com a variação do número de torções?

Este trabalho apresenta o formalismo do potencial confinante da equação de Schrödinger obtida para o confinamento de uma partícula quântica em uma superfície do tipo faixa de Möbius, associando os métodos analíticos e numéricos utilizados para obter as soluções das equações de Schrödinger com os métodos de análise computacionais. Apresentaremos no capítulo 3 a fundamentação teórica do trabalho, apresentando os conceitos de geometria diferencial de superfícies, os aspectos de mecânica quântica nas abordagens intrínseca e extrínseca, além dos conceitos de simulação computacional. No capítulo 4, descreveremos as metodologias aplicadas no trabalho. Em seguida, no capítulo 5, investigamos os resultados obtidos a partir da mecânica quântica associada a uma faixa de Möbius e a sua relação com as propriedades físico-químicas calculadas por meio de simulações computacionais, verificando o seu comportamento com o aumento do tamanho da faixa e o aumento no número de torções. E por fim, no capítulo 5, resumimos as conclusões retiradas dos resultados da pesquisa e traremos nossas perspectivas futuras para o desenvolvimento desta linha de pesquisa.

2 Objetivos

2.1 Geral

- Estudar a mecânica quântica em uma superfície não orientável do tipo faixa de Möbius.

2.2 Específicos

- Analisar o problema do confinamento extrínseco em faixas de Möbius variando a quantidade de torções e o raio;
- Analisar as propriedades físico-químicas das Nanofaixas de Möbius formadas por anéis de benzeno;
- Estudar os efeitos da ausência de simetria e das substituições nos anéis de benzenos presentes nas faixas.

3 Fundamentação Teórica

3.1 Superfície

A princípio, é necessário nos aprofundarmos nas definições e propriedades das superfícies parametrizadas regulares. E para isso tomaremos como base os conceitos explorados por Tenenblat (2009) para as propriedades geométricas locais de superfícies no espaço Euclidiano \mathbb{R}^3 . Assumindo um sistema de coordenadas x, y, z em \mathbb{R}^3 , podemos considerar uma função

$$S(u, v) = (x(u, v), y(u, v), z(u, v)) \quad (1)$$

em u e v , uma superfície parametrizada regular como uma aplicação $S : U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$, onde U é um aberto de \mathbb{R}^2 , tal que S seja diferenciável de classe C^∞ , ou seja, tenha derivadas parciais de todas as ordens contínuas, e para todo ponto $q = (u, v)$ pertence U , a $dS_q : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ é injetora.

Sendo X o subconjunto formado pelos pontos $S(u, v)$, denominado traço de S . Sendo assim, podemos encontrar as derivadas parciais de primeira e segunda ordem da superfície S pelas seguintes expressões:

$$S_u = \frac{\partial S_n(u, v)}{\partial u}, \quad (2)$$

$$S_v = \frac{\partial S_n(u, v)}{\partial v}, \quad (3)$$

$$S_{uu} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial u^2}, \quad (4)$$

$$S_{uv} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial u \partial v} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial v \partial u} \quad (5)$$

e

$$S_{vv} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial v^2}. \quad (6)$$

Tendo isso em mãos, podemos definir algumas propriedades referentes a S . A primeira delas são os coeficientes da primeira forma quadrática E , F e G , que são denotadas

$$E = \langle S_u, S_u \rangle, \quad (7)$$

$$F = \langle S_u, S_v \rangle \quad (8)$$

e

$$G = \langle S_v, S_v \rangle. \quad (9)$$

Da mesma maneira podemos encontrar os coeficientes da segunda forma quadrática L, M e N

$$L = \langle S_{uu}, \vec{n} \rangle, \quad (10)$$

$$M = \langle S_{uv}, \vec{n} \rangle \quad (11)$$

e

$$N = \langle S_{vv}, \vec{n} \rangle. \quad (12)$$

onde \vec{n} é o vetor normal à S, que é dado pelo produto vetorial das derivadas parciais de primeira ordem S_u e S_v divididas pelo norma desse produto vetorial, como mostrado abaixo:

$$\vec{n} = \frac{S_u \times S_v}{|S_u \times S_v|}. \quad (13)$$

Com as componentes da primeira e da segunda forma quadrática podemos escrever as curvaturas média (H_s) e gaussiana (K_s) da superfície

$$H_s = \frac{LG - 2MF + EN}{2(EG - F^2)} \quad (14)$$

e

$$K_s = \frac{LN - M^2}{EG - F^2}. \quad (15)$$

Outro parâmetro importante que podemos obter a partir dos coeficientes da primeira forma quadrática, que permitirá a introdução da noção de distância entre os pontos dentro do conjunto (SILVA FILHO, 2018), é a métrica do sistema g, que pode ser escrito como

$$g = \det \begin{vmatrix} E & F \\ F & G \end{vmatrix} = EG - F^2. \quad (16)$$

Ainda de acordo com Silva Filho(2018), com as equações (7), (8) e (9) e a equação (16) podemos obter o operador laplace-beltrami correspondente à

superfície (como podemos verificar na equação 17), que é dependente apenas dos coeficientes da primeira forma quadrática.

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{\sqrt{g}} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{E} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{F} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial v} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{F} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{G} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial v} \right) \right] \quad (17)$$

3.2 Mecânica Quântica

Embasado nos trabalhos apresentados por Atanasov, Dandoloﬀ e Saxena (2009), Liu, Tang, e Xun (2011), Nussenzveig (2014) e da Silva, Bastos e Ribeiro (2017), que abordam o estudo das interações entre geometria diferencial e mecânica quântica, temos que inicialmente introduzir a Equação de Schrödinger.

A equação de autovalor que é utilizada para descrever sistemas quânticos é chamada de Equação de Schrödinger (1926, apud NUSSENZVEIG, 2014). no qual um operador Hamiltoniano (H) aplicado a uma função de onda (Ψ) resulta na Energia do sistema e a própria função de onda. Sendo assim, a Equação de Schrödinger numa superfície riemanniana para uma partícula de massa (m) sob a influência de um potencial (V), pode ser escrita como

$$E\Psi = H\Psi. \quad (18)$$

onde o operador Hamiltoniano pode ser escrito como a soma dos operadores energia cinética e o de energia potencial do sistema:

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi. \quad (19)$$

Sendo assim, podemos modelar a partir do sistema quântico específico a ser estudado o operador Hamiltoniano, dado que ele apresentará como resultado um espectro de energia também específico. Como por exemplo no caso de uma partícula confinada numa curva contida no espaço Euclidiano considerando apenas a região do confinamento sem considerar a região que o contém, onde o Hamiltoniano depende apenas do termo cinético, conhecido como abordagem intrínseca, que pode ser escrita como:

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{LB}, \quad (20)$$

onde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ e Δ_{LB} o operador laplaciano.

Outra abordagem que podemos considerar é a extrínseca, descrita por Da Costa(1981), que consiste na aplicação de um potencial confinante forte para

restringir o movimento da partícula na superfície estudada. Onde o potencial aplicado depende especialmente da curvatura média da superfície, o que faz com que, ao contrário do caso anterior que depende apenas do Lagrangiano, não existam potenciais iguais para superfícies isométricas.

Considerando isso o Hamiltoniano de Da Costa(extrínseco) é expresso da seguinte forma:

$$H_{dcs} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB} - \frac{\hbar^2}{2m}(H^2 - K), \quad (21)$$

com H sendo a curvatura Média e K a curvatura Gaussiana da superfície.

3.3 Simulações Computacionais

De acordo com Sá (2020), existem diversos pacotes computacionais que apresentam diversas ferramentas capazes de investigar as propriedades físico-químicas de sistemas, como as propriedades geométricas, eletrônicas, entalpia, Orbital molecular de maior energia que foi ocupado por elétrons (HOMO), Orbital molecular de menor energia ainda não ocupado por elétrons (LUMO), energia de ionização, densidade eletrônica, entre outras. Podemos destacar alguns desses softwares de química computacional, como por exemplo o Gaussian, o GAMESS, o HyperChem, o MOPAC e o ORCA. Porém, para utilizar estes programas, devemos entender melhor quais métodos devemos utilizar para descrever a equação relacionada ao objeto de estudo.

A função de onda associada a um sistema depende da posição dos seus elétrons e núcleos, bem como as suas interações, o que para um sistema simples (como para um átomo de Hidrogênio, por exemplo) pode ser fácil de determinar, se torna complexo quando tratamos de sistemas poliatômicos mais complexos. Para isso utilizamos de aproximações, como a de Born-Oppenheimer, onde núcleos atômicos são considerados fixos com relação aos elétrons, fazendo com que o sistema dependa somente da posição dos elétrons. Os exemplos mais comumente utilizados são o método de Hartree-Fock (HF) e a Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês Density Functional Theory)(LIMA, 2021).

3.3.1 Teoria do Funcional da Densidade (DFT)

Algumas das primeiras aplicações relevantes para a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) surgiram de campos distantes da mecânica quântica, como por exemplo a mineralogia e a biologia. Nos dias atuais ela é mais utilizada para

calcular a energia de ligação de moléculas e estruturas de bandas sólidas em física, por exemplo. Mas, para ter uma ideia melhor sobre o método (que é um dos mais populares e bem sucedidos), é necessário recapitular alguns elementos da mecânica quântica (CAPELLE, 2006).

O método DFT surgiu a partir dos trabalhos de Hohenberg e Kohn (HK) em 1964 e Kohn e Sham em 1965, para o cálculo de propriedades eletrônicas de sistemas de moléculas. Para descrever a Teoria do Funcional da Densidade, utilizaremos o formalismo apresentado por Díaz Suárez(2015). Dada a representação para a densidade eletrônica (ρ) que depende apenas das coordenadas espaciais

$$\rho = \rho(r) = \sum_i |\varphi_i(r)|^2 \quad (22)$$

onde r é um ponto do espaço, o DFT está baseado em duas hipóteses: I) O potencial externo $v_{ext}(r)$ a que estão sujeitos os elétrons é um funcional único da densidade eletrônica $\rho(r)$, exceto por uma constante aditiva; II) É possível definir um funcional $E\rho$ em termos de densidade, válido para qualquer $v_{ext}(r)$. A energia do estado fundamental $E_0\rho$ é mínima para uma densidade que minimiza o funcional.

O Hamiltoniano descrito pelo sistema, onde $v_{ext} = \sum_i v_{ext}(ri)$ é o potencial externo, v_{ee} representa o potencial de interação elétron-elétron e T representa o operador de energia cinética total, pode ser representado por:

$$H = T + V_{ee} + V_{ext}. \quad (23)$$

Logo, o funcional de Kohn-Sham é dado por :

$$E[\rho(r)] = T_0[\rho(r)] + \int v_{ext}\rho(r)dr + \frac{1}{2} \int \int \rho(r) \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr dr' + E_{xc}[\rho(r)], \quad (24)$$

na qual $T_0[\rho(r)]$ é o funcional da energia cinética do sistema de elétrons não interagentes com densidade $\rho(r)$, e $E_{xc}[\rho(r)]$ é a energia de troca e correlação, que contém toda informação sobre os efeitos de muitos corpos. Sendo a sua minimização com respeito a $\rho(r)$

$$h^{kH}|\varphi_i^{kS}\rangle = [-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{ext}(r) + \int \rho(r) \frac{1}{|r - r'|} dr' + v_{xc}(r)]|\varphi_i^{kS}\rangle = \varepsilon_i|\varphi_i^{kS}\rangle \quad (25)$$

na qual o termo

$$v_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho(r)} \quad (26)$$

é chamado de potencial de troca e correlação $E_{xc}[\rho(r)]$, tendo várias propostas para estes funcionais de troca e correlação, que consideram diferentes tipos de aproximações, que estão diretamente ligados à precisão dos cálculos DFT.

Uma dessas propostas para $E_{xc}[\rho(r)]$ é a chamada de funcionais híbridos (como por exemplo o B3LYP, O3LYP, PBE0 e BhandHLYP), que se utilizam de uma combinação de funcionais puros e o termo de troca de HF, tem algumas de suas propriedades moleculares descritas de forma mais precisa. De modo geral, estes funcionais híbridos são expressos com:

$$E_{xchib} = aE_xHF + (1 - a)E_xDFT + E_cDFT \quad (27)$$

onde o coeficiente a assume um valor específico ou é ajustado a alguma propriedade de bancos de dados moleculares.

Dentre os funcionais híbridos, um dos mais populares é o funcional B3LYP, que tem os seus coeficientes semi empíricos a_0 , a_x e a_c determinados por dados experimentais:

$$E_{xc}^{B3LYP} = E_{xc}^{LSDA} + a_0(E_x^{exact} - E_x^{LSDA}) + a_x\Delta E_x^{B88} + a_c\Delta E_c^{PW91}, \quad (28)$$

onde E_x^{exact} é a energia de troca de HF, ΔE_x^{B88} é a correção do termo de troca de Becke 1988, E_c^{PW91} é a correção do termo de correlação de Perdew e Wang e para o termo E_{xc}^{LSDA} é usada a parametrização da referência.

3.3.2 Programa Gaussian

Comercializado desde a década de 70, o software Gaussian apresenta uma grande qualidade nos resultados apresentados para diversos tipos de cálculos de sistemas de moléculas, que se utilizam de métodos como ab initio (como o Hartree-Fock, por exemplo), semi-empíricos e DFT. Sendo este último o mais indicado para sistemas com mais de 100 átomos, com uma lista de funcionais (B3LYP, PBE1PBE, LSDA, BPV86, HCTH e MPW1PW91). Possibilitando o cálculo de energia do estado fundamental, energia cinética, otimização de geometria IR, UV- Vis, Raman e NMR, e outras (BASTOS, 2012).

3.3.3 Propriedades métodos computacionais

De acordo com Ahmed, Islam e Ahmed (2023), para um sistema formado por átomos de Carbono e Hidrogênio aplicados ao método DFT com o funcional B3LYP no programa Gaussian 09W, temos que a energia de formação (E_{form}) é calculada através da seguinte equação

$$E_{form} = E - (uE_C + vE_H), \quad (29)$$

onde E é a energia da estrutura calculada, E_C e E_H são, respectivamente as energias de um único átomo de C e H, e u e v correspondem às suas quantidades presentes na estrutura estudada.

Para as propriedades eletrônicas, podemos obter as densidades de estado (DOS), o gap de energia e a transferência de carga entre átomos através da análises da cargas de Hirshfeld e Mulliken. Além disso, podemos determinar o gap de energia entre o HOMO e o LUMO

$$E_{gap} = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (30)$$

Por fim, também podemos obter a partir dos cálculos computacionais a Dureza absoluta (η), Moleza absoluta (δ), Potencial químico (μ) e Eletroafinidade (ω) do sistema, conforme as equações a seguir, que dependem dos valores de HOMO e LUMO encontrados

$$\eta = \frac{E_{LUMO} - E_{HOMO}}{2} \quad (31)$$

$$\delta = \frac{1}{\eta} \quad (32)$$

$$\mu = \frac{E_{LUMO} + E_{HOMO}}{2} \quad (33)$$

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad (34)$$

4 Metodologia

Na primeira etapa metodológica deste trabalho buscaremos explorar um conjunto de superfícies análogas a nanofaixas de Möbius com diferentes números de torções e tamanhos pela perspectiva extrínseca, e na segunda analisaremos possíveis propriedades físico-químicas derivadas destes modelos por meio de simulação computacional.

4.1 Curvaturas e Função de onda

Consideramos o problema do confinamento de elétrons não interagentes em superfícies do tipo Faixa de Möbius e, devido a simetria da superfície, aplicamos uma mudança de coordenadas cartesianas para coordenadas cilíndricas. E então, obtivemos os coeficientes das primeiras formas fundamentais (E, F, G), os coeficientes da segunda forma fundamental (L, M, N), e o vetor normal (\vec{n}) à superfície. Após isso, determinamos as curvaturas Gaussiana e Média da superfície estudada.

Com as curvaturas definidas, obtivemos Operador Laplace-Beltrami (Δ_{LB}) e o Potencial da Costa (V_{DC}), e com isso foi possível obter as expressões para os hamiltonianos extrínseco (Da Costa), e avaliar a influência das torções e do raio da faixa nesse potencial geométrico.

4.2 Métodos Computacionais

Na etapa do cálculo computacional, foram geradas nanoestruturas usando o software Nanotube Modeler 1.8.0 e adicionadas torções e outras modificações através do software Gaussview 5.0. Todas as estruturas foram otimizadas a nível semi-empírico (PM3) com o programa MOPAC 2016. Foram modeladas estruturas compostas por anéis de benzeno - 20, 30, 40, 50 e 60 números de anéis(b) - que variam o número de torção(n) de 0 a 5.

Com os modelos otimizados, foram conduzidos testes, utilizando-se o software Gaussian 9, cálculos DFT a nível B3LYP/lanl1mb, que são condizentes com o tipo e tamanho das estruturas estudadas. Os resultados obtidos foram examinados através da análise dos dados obtidos no software e com a geração de tabelas e gráficos, construídos com auxílio do programa OriginPro 2016.

As propriedades físico-químicas observadas foram: o comportamento da energia, densidade de carga, momento de dipolo e densidade de orbital, gap homolumo e a eletronegatividade do sistema, variando o número de torções e o ta-

manho das faixas. Além disso foram calculados também utilizando o método Hartree-Fock-Roothaan (HF) para que houvesse a comparação entre funcionais de densidade no estudo destas propriedades para o sistema estudado.

Por fim, foram feitas análise de faixas não regulares, ou seja, que apresentavam falta de simetria entre as torções, e também foram introduzidas substituições com grupos ativadores (CH_3 e NH_2) e desativadores (NO_2 e Cl) para avaliar os efeitos dessas nas propriedades verificadas anteriormente.

5 Resultados obtidos

5.1 Função de onda e Curvaturas

5.1.1 Parametrização da fita de Möbius e Curvaturas

Dada a parametrização da superfície S_n para uma faixa de Möbius, temos que o traço X de S_n é representado conforme a Figura 6

$$S_n(u, v) = \left[\left(r + u \sin\left(\frac{nv}{2}\right) \right) \cos v, \left(r + u \sin\left(\frac{nv}{2}\right) \right) \sin v, u \cos\left(\frac{nv}{2}\right) \right], \quad (35)$$

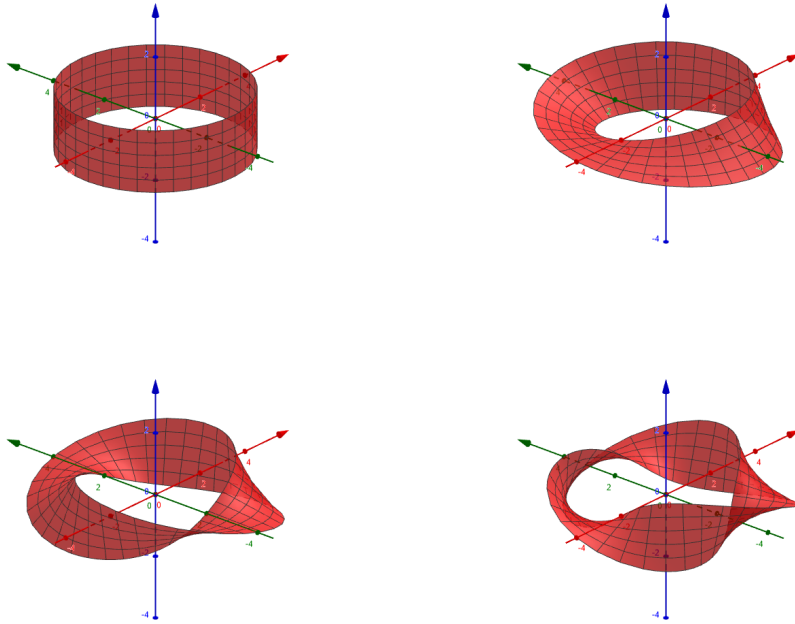


Figura 6: Faixas de Möbius para diferentes valores de n .
Fonte: O autor.

onde $u \in [0, h]$, com h sendo a largura da faixa, $v \in [0, 2\pi)$, n é igual ao número de torções e r é o raio do cilindro base.

Aplicando a mudança para coordenadas cilíndricas, temos a seguinte parametrização:

$$S_n(u, v) = \left[r + u \sin\left(\frac{nv}{2}\right) \right] \hat{\rho} + \left[u \cos\left(\frac{nv}{2}\right) \right] \hat{k}. \quad (36)$$

Assim, podemos definir os vetores tangentes à superfície S_n

$$S_u = \frac{\partial S_n(u, v)}{\partial u} = [\sin(\frac{nv}{2})]\hat{\rho} + [\cos(\frac{nv}{2})]\hat{k} \quad (37)$$

$$S_v = \frac{\partial S_n(u, v)}{\partial v} = [(\frac{nu}{2})\cos(\frac{nv}{2})]\hat{\rho} + [r + u\sin(\frac{nv}{2})]\hat{\theta} + [-(\frac{nu}{2})\sin(\frac{nv}{2})]\hat{k} \quad (38)$$

Logo, os componentes da primeira forma fundamental são:

$$E = \langle S_u, S_u \rangle = 1, \quad (39)$$

$$F = \langle S_u, S_v \rangle = 0 \quad (40)$$

e

$$G = \langle S_v, S_v \rangle = (\frac{nu}{2})^2 + (r + u\sin(\frac{nv}{2}))^2. \quad (41)$$

Partindo disto, obtemos o determinante da métrica, que é dado pela expressão $g = EG - F^2$

$$g = G = (\frac{nu}{2})^2 + (r + u\sin(\frac{nv}{2}))^2 \quad (42)$$

Para o vetor normal \vec{n} da superfície temos que

$$S_u \times S_v = \begin{pmatrix} i & j & k \\ \sin(\frac{nv}{2}) & 0 & \cos(\frac{nv}{2}) \\ (\frac{nu}{2})\cos(\frac{nv}{2}) & r + u\sin(\frac{nv}{2}) & -(\frac{nu}{2})\sin(\frac{nv}{2}) \end{pmatrix} \quad (43)$$

$$S_u \times S_v = [(-\cos(\frac{nv}{2}))(r + u\sin(\frac{nv}{2})), (\frac{nu}{2}), (\sin(\frac{nv}{2}))(r + u\sin(\frac{nv}{2}))] \quad (44)$$

$$\cos \phi = \frac{\langle S_u, S_v \rangle}{|S_u| \cdot |S_v|} = 0 \quad (45)$$

$$\phi = \arccos 0 = \frac{\pi}{2} \quad (46)$$

$$|S_u \times S_v| = |S_u| \cdot |S_v| \cdot \sin \phi = \sqrt{g} \quad (47)$$

$$\vec{n} = \frac{S_u \times S_v}{|S_u \times S_v|} \quad (48)$$

Logo,

$$\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{g}} \cdot [(-\cos(\frac{nv}{2}))(r + u \sin(\frac{nv}{2})), (\frac{nu}{2}), (\sin(\frac{nv}{2}))(r + u \sin(\frac{nv}{2}))] \quad (49)$$

Para a obtenção dos componentes da segunda forma fundamental utilizaremos as seguintes derivadas parciais de segunda ordem:

$$S_{uu} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial u^2} = 0 \quad (50)$$

$$S_{uv} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial u \partial v} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial v \partial u} = [\frac{n}{2} \cos(\frac{nv}{2})]\hat{\rho} + [\sin(\frac{nv}{2})]\hat{\theta} - [\frac{n}{2} \sin(\frac{nv}{2})]\hat{k} \quad (51)$$

$$S_{vv} = \frac{\partial^2 S_n(u, v)}{\partial v^2} \quad (52)$$

$$S_{vv} = -[\frac{n^2 u}{4} \sin(\frac{nv}{2}) + r + u \cos(\frac{nv}{2})]\hat{\rho} + [(nu) \cos(\frac{nv}{2})]\hat{\theta} - [\frac{n^2 u}{4} \cos(\frac{nv}{2})]\hat{k} \quad (53)$$

Sendo assim os componentes da segunda forma fundamental são:

$$L = \langle S_{uu}, \vec{n} \rangle = 0 \quad (54)$$

$$M = \langle S_{uv}, \vec{n} \rangle = \frac{nr}{2\sqrt{g}} \quad (55)$$

$$N = \langle S_{vv}, \vec{n} \rangle = \frac{(\cos(\frac{nv}{2})) \cdot (2r^2 + 4ru \sin(\frac{nv}{2}) + 2u^2 \sin^2(\frac{nv}{2}) + n^2 u^2)}{2\sqrt{g}} \quad (56)$$

Com isso, temos que a Curvatura média H e Curvatura gaussiana K da superfície S_n é

$$H = \frac{LG - 2MF + EN}{2(EG - F^2)} = \frac{N}{2G}$$

e

$$K = \frac{LN - M^2}{EG - F^2} = \frac{-M^2}{G}$$

Aplicando os componentes da primeira e da segunda forma fundamental obtemos a seguinte expressão de H para as curvaturas variando o raio e também o número de torções:

$$H = \frac{(\cos(\frac{nv}{2}))(2r^2 + 4ru \sin(\frac{nv}{2}) + 2u^2 \sin^2(\frac{nv}{2}) + n^2u^2)}{[(nu)^2 + (2r)^2 + 4u(2r \sin(\frac{nv}{2}) + u \sin^2(\frac{nv}{2}))]^{\frac{3}{2}}} \quad (57)$$

No caso particular onde $n=0$, temos que a curvatura média é constante igual a $H_s = \frac{1}{4r}$. Ou seja, à medida em que aumentamos o raio da faixa sem torções menor será o valor da sua curvatura média (H_s). Ao visualizarmos o gráfico formado a partir da curvatura média (Figura 7), onde o eixo horizontal representa a largura da faixa u (que varia de -1 até 1) e o eixo vertical indica a posição radial em torno do eixo v (indo de 0 à 2π), podemos observar que, a medida em que fixamos o raio da faixa e aumentamos o número de torção formam-se uma regiões de pico de curvatura onde a curvatura média atinge os seus máximos e outras que atingem os mínimos, que acompanham o número de torções. Estas regiões de máximos e mínimos se encontram ao redor de onde as torções se apresentam na faixa, como por exemplo no “gráfico a” da Figura 7, onde a torção se encontra na parte central da faixa ($v=\pi$).

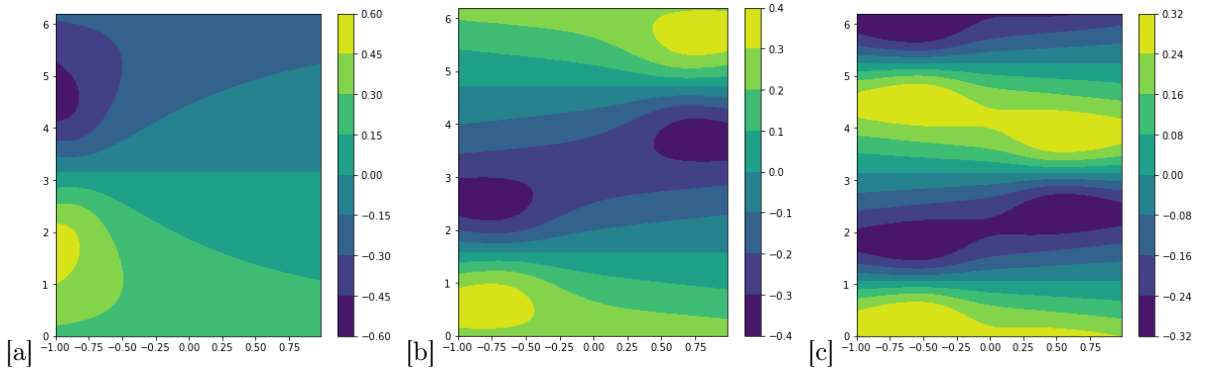


Figura 7: Curvaturas Médias para (a) $n=1$ (b) $n=2$ (c) $n=3$.

Fonte: O autor.

À medida em que aumentamos esse número de torção também podemos perceber que os valores desses máximos da curvatura média são cada vez menores pois se dissipam para mais áreas. Este comportamento apresenta um ponto onde praticamente não existe variação entre os valores máximos com esse au-

mento do número de torções. Contudo, este comportamento onde a curvatura média é invariante com o aumento da torção depende do tamanho da faixa, onde quanto maior o tamanho da faixa menor é o número de torções necessárias para verificarmos esta invariância. Ao fixarmos os valores do número de torção e variarmos o tamanho da faixa, percebemos um outro comportamento. Com o aumento do raio da nossa faixa (no caso da Figura 8, 9 e 10 variam em 1 unidade de raio), percebemos que o valor máximo dessa curvatura se torna cada vez menor

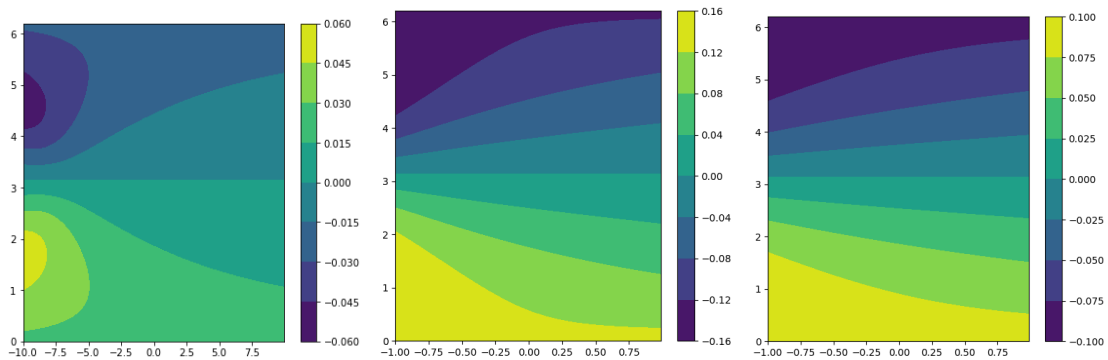


Figura 8: Curvaturas Médias para $n=1$ com o aumento do tamanho das faixas.
Fonte: O autor.

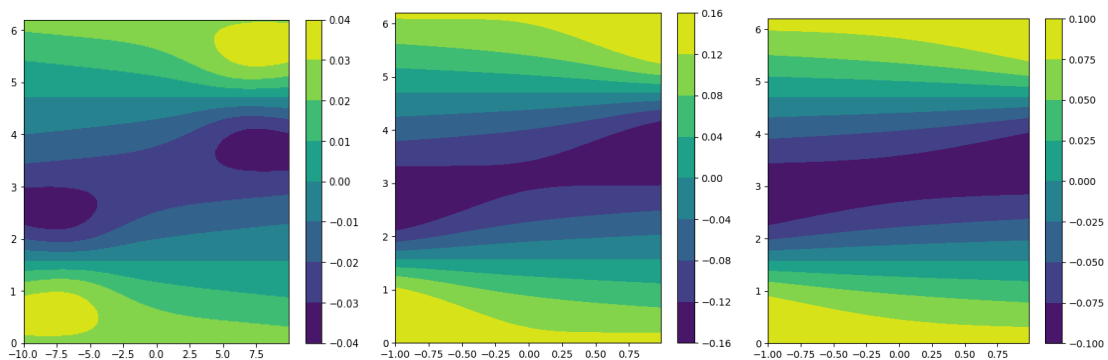


Figura 9: Curvaturas Médias para $n=2$ com o aumento do tamanho das faixas.
Fonte: O autor.

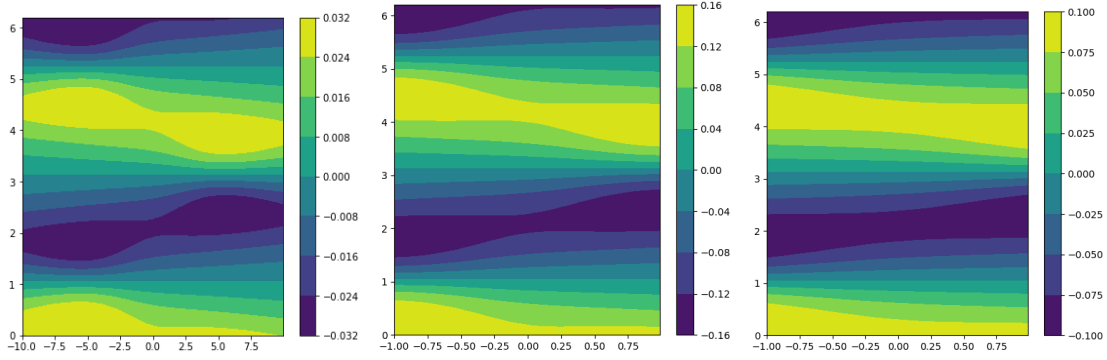


Figura 10: Curvaturas Médias para $n=3$ com o aumento do tamanho das faixas.
Fonte: O autor.

Sendo assim, é possível obter dois comportamentos da análise da curvatura média de S_n : o primeiro é que quanto maior a quantidade de torções, menor será o valor máximo de H_s até que ele atinja um valor onde permanece praticamente invariável; E o segundo é que quanto maior for o tamanho dessa faixa menor será o valor de H_s , e menor será o número de torções necessárias para atingir o ponto invariável.

Avaliando a curvatura gaussiana dada pela expressão a seguir

$$K = -\frac{(2nr)^2}{[(nu)^2 + (2r)^2 + 4u(2r \sin(\frac{nv}{2}) + u \sin^2(\frac{nv}{2}))]^2} \quad (58)$$

temos os seguintes gráficos (Figura 11) fixando o raio da faixa e variando o número de torções:

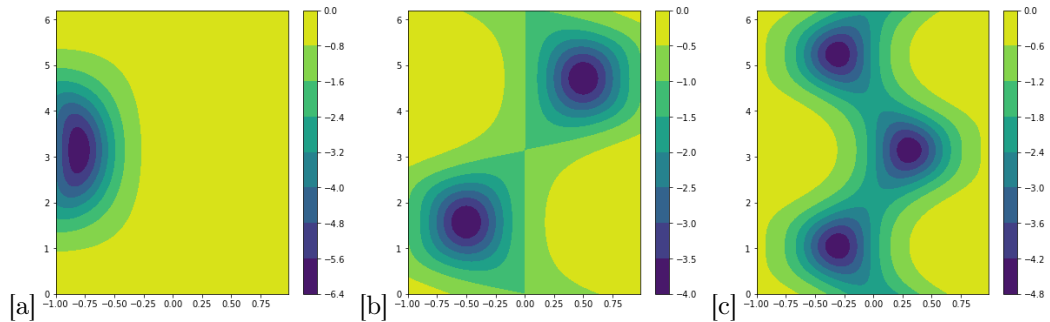


Figura 11: Curvaturas Gaussianas para (a) $n=1$ (b) $n=2$ (c) $n=3$.
Fonte: O autor.

No gráfico da curvatura da gaussiana podemos observar que existe uma região na faixa em que a curvatura admite um valor mais negativo possível, e que esse número de regiões varia de acordo com o número de torções. Observamos também que quanto maior o número de torções podemos perceber que menos

negativa será essa região, assim como no caso da curvatura média. Verificando agora o que acontece com o aumento do tamanho da faixa, temos os seguintes gráficos (Figuras 12, 13 e 14).

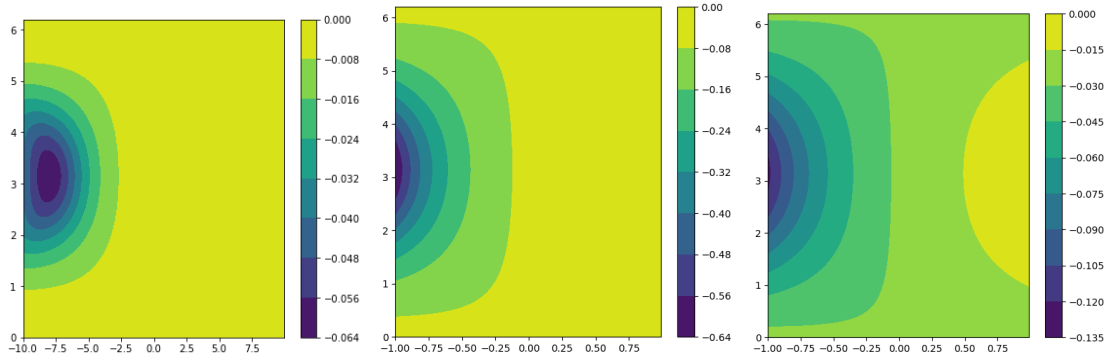


Figura 12: Curvaturas Gaussianas para $n=1$ com o aumento do tamanho das faixas.
Fonte: O autor.

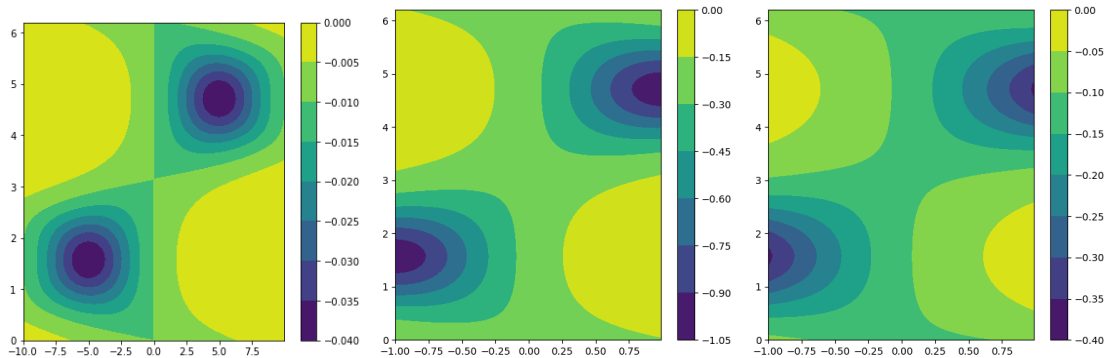


Figura 13: Curvaturas Gaussianas para $n=2$ com o aumento do tamanho das faixas.
Fonte: O autor.

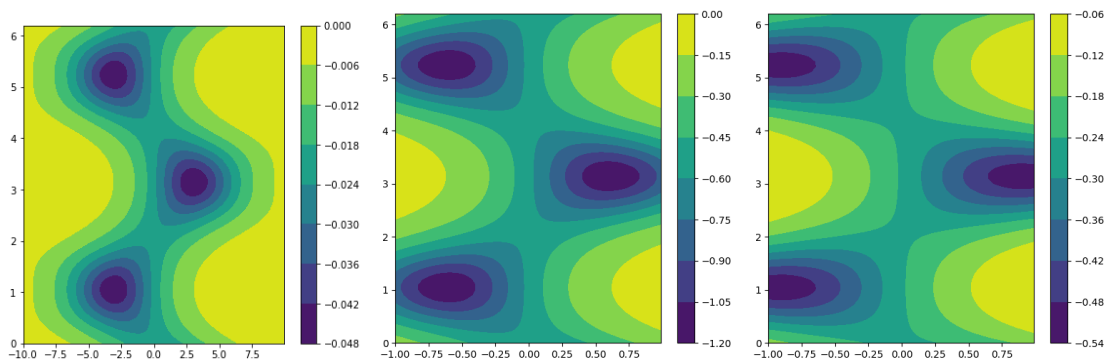


Figura 14: Curvaturas Gaussianas para $n=3$ com o aumento do tamanho das faixas.
Fonte: O autor.

Podemos observar que tanto a curvatura média quanto a curvatura da gaussiana são menores quanto maior for o raio e quanto maior for o número de torções.

Logo, quanto maior for o tamanho da faixa e menor for o número de torções menores vão ser as influências em cada uma dessas regiões, porém o número de regiões aumenta com o n .

5.1.2 A equação de Schrödinger, o Operador Laplace-Beltrami(Δ_{LB}) e o Potencial da Costa(V_{DC})

Visto que o Hamiltoniano na equação de Schrödinger ($E\Psi = H\Psi$) para o caso intrínseco pode ser descrito por

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB}, \quad (59)$$

temos que determinar o Operador Laplace-Beltrami(Δ_{LB}) que descreva as nossas superfícies estudadas. Sendo assim, com os componentes da primeira e da segunda forma fundamental, obtivemos a seguinte expressão

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{\sqrt{g}} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{E} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{G} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial v} \right) \right]. \quad (60)$$

$$\Delta_{LB} = \frac{(n^2u + 4r \sin(\frac{nv}{2}) + 4u \sin^2(\frac{nv}{2}))}{\Gamma} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{(8nru \cos(\frac{nv}{2}) + nu^2 \sin nv)}{\Gamma^2} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{4}{\Gamma} \frac{\partial^2}{\partial v^2}. \quad (61)$$

Sendo,

$$\Gamma = n^2u^2 + 4r^2 + 8ru \sin\left(\frac{nv}{2}\right) + 4u^2 \sin^2\left(\frac{nv}{2}\right) \quad (62)$$

Porém ao utilizarmos a abordagem extrínseca de Da Costa, no qual aplicamos um potencial (V) confinante, que está associado as curvaturas médias e gaussianas, utilizaremos o Hamiltoniano de Da Costa (H_{dcs})

$$H_{dcs} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB} - V_{dcs} \quad (63)$$

onde

$$V_{dcs} = -\frac{\hbar^2}{2m}(H^2 - K) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N^2 + 4GM^2}{4G^2}\right). \quad (64)$$

Dada que a diferença entre as abordagens intrínsecas e extrínsecas advém do potencial Da Costa, analisaremos separadamente a influência dessa expressão. O V_{dcs} associado ao nosso sistema admite a seguinte expressão

$$V_{dcs} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{[\cos^2(\frac{nv}{2})] [2r^2 + 4ru \sin(\frac{nv}{2}) + 2u^2 \sin^2(\frac{nv}{2}) + n^2u^2]^2}{16G^3} + \frac{n^2r^2}{4G^2} \right). \quad (65)$$

E, com isso, construímos o gráfico (Figura 15) que está associando esse potencial com o número de torções da faixa, onde temos que existem regiões (que acompanham o número de torções) que admitem um par de zonas com os maiores valores possíveis para esse potencial. Quanto maior for o número de torções maior será o potencial que está associado a isso, admitindo o mesmo valor para o raio da faixa.

Quando mantemos o número de torção e aumentamos o raio da faixa (Figuras 16, 17 e 18) percebemos que maior vai ser a influência dessa torção para esse potencial quanto ao seu valor e o tamanho da região potencial, pois seus valores serão cada vez maiores os valores. O que indica que quanto maior o tamanho da faixa maior é a influência da região potencial confinante

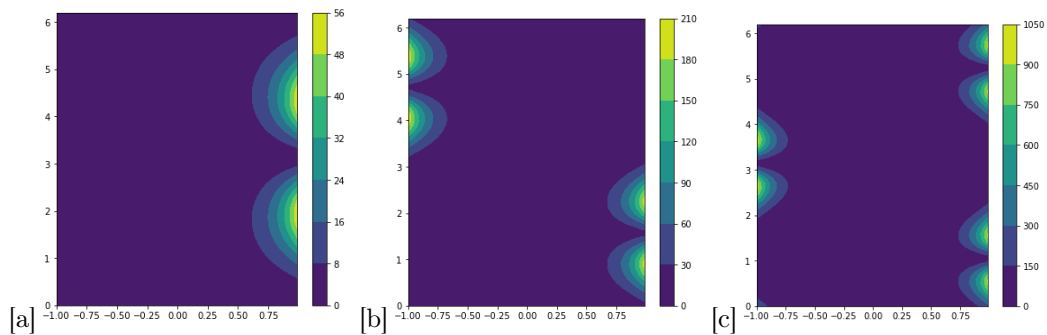


Figura 15: Potencial da Costa(V_{dcs}) para (a) $n=1$ (b) $n=2$ (c) $n=3$.
Fonte: O autor.

Em resumo, o aumento número de torções aumenta o valor dessas zonas de potencial, e que ao aumentarmos o tamanho das faixas esses valores aumentam ainda mais. De posse desses dados, discutiremos na próxima sessão como esse comportamento verificado pode ser observado nos dados computacionais obtidos em sistemas de moléculas que são análogas à faixas de Möbius.

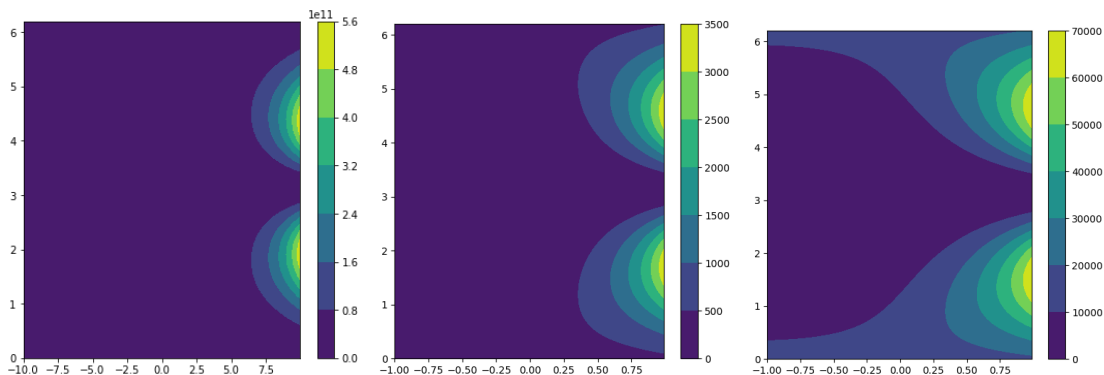


Figura 16: Potencial da Costa(V_{dcs}) para $n=1$ com o aumento do tamanho das faixas.
Fonte: O autor.

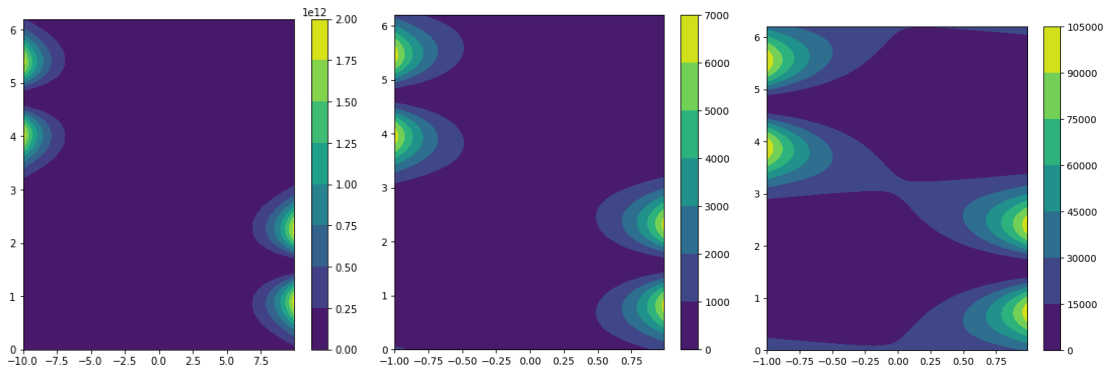


Figura 17: Potencial da Costa (V_{dcs}) para $n=2$ com o aumento do tamanho das faixas.
 Fonte: O autor.

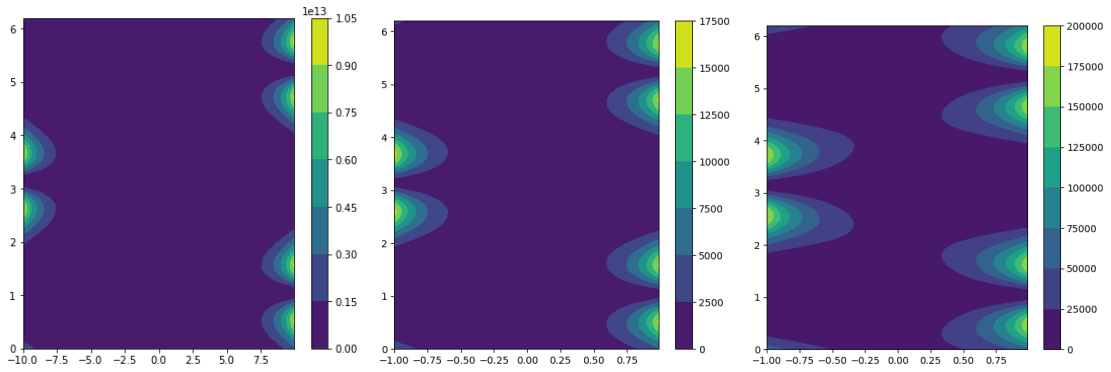


Figura 18: Potencial da Costa (V_{dcs}) para $n=3$ com o aumento do tamanho das faixas.
 Fonte: O autor.

5.2 Resultados Computacionais

Para analisar os resultados computacionais obtidos é necessário, antes de tudo, apresentar algumas definições relativas às faixas estudadas. Usaremos a notação "b + número de anéis de benzeno" para nomear as faixas de acordo com o seu tamanho (por exemplo, para uma faixa com 35 anéis de benzeno usaremos b35). E para indicar o número de torções da faixa usaremos n + número de torções da faixa (por exemplo, uma faixa de 3 torções será indicada por n3), conforme observado na Figura 19.

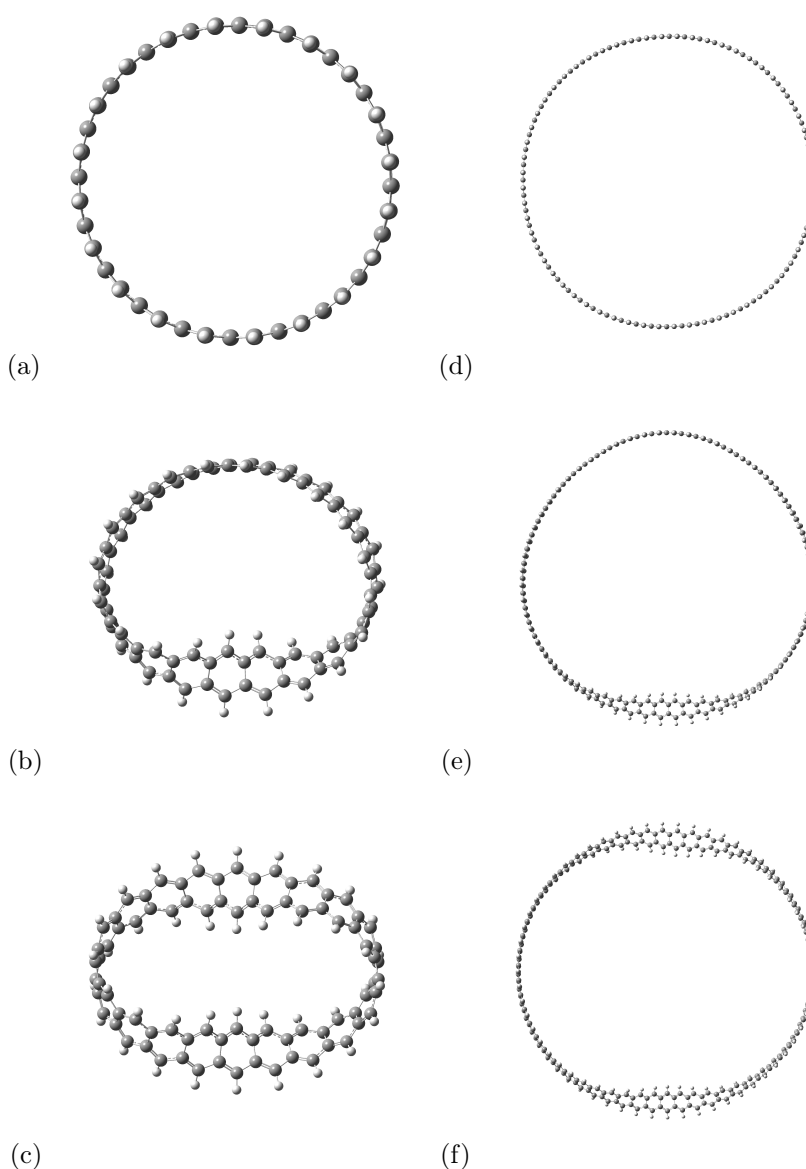


Figura 19: Faixas (a)b20n0, (b)b20n1, (c)b20n2, (d)b60n0, (e)b60n1 e (f)b60n2.

Fonte: O autor.

Nesse primeiro estágio as faixas serão formadas apenas por Hidrogênios (H) e Carbonos (C), sendo este último dividido entre C_i , os carbonos presentes na parte interna da faixa e se liga apenas a outros Carbonos, e C_e , que são os carbonos mais externos que fazem ligação com os hidrogênios, como indicado na Figura 20.

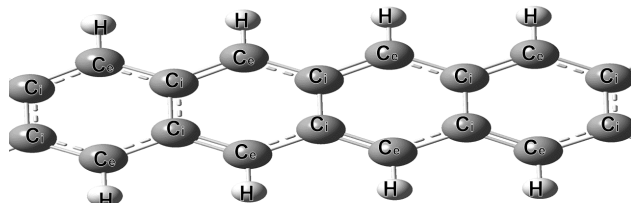


Figura 20: C_i , C_e e H.
Fonte: O autor.

Outro ponto que precisa ser esclarecido são os conceitos de dentro e fora da torção e externos e internos. Entendemos como fora da torção as regiões que se encontram perpendiculares ao plano (como numa faixa sem torções, e) dentro da torção a região da faixa que se encontra paralelo ao plano horizontal, e nessa região que temos os átomos que estão na parte interna (ou seja, voltados para o centro da faixa), marcados em azul, e os externos voltados para fora da faixa, marcados em amarelo, conforme indicado na Figura 21.

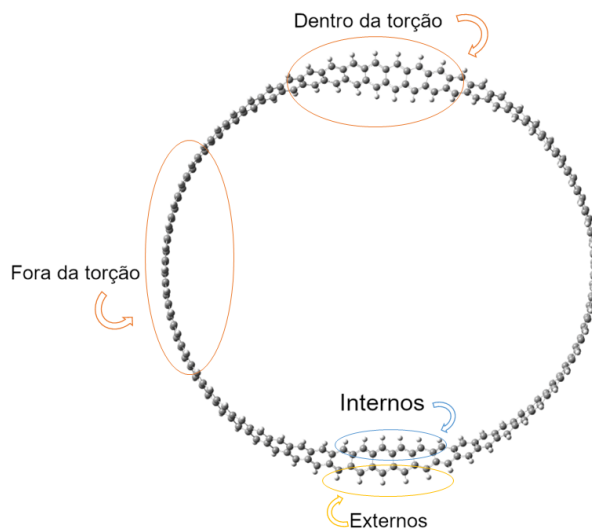


Figura 21: Definições de dentro e fora da torção e átomos internos e externos.
Fonte: O autor.

5.2.1 Energia

Com os resultados para os modelos moleculares calculados para as faixas b20, b30, b40, b50, e b60 variando o de n0 à n5, utilizando DFT B3LYP lanl1mb, obtivemos o seguinte comportamento observado na Figura 22, que relaciona a energia dos sistemas sem torções(n=0) com o número de anéis na faixa:

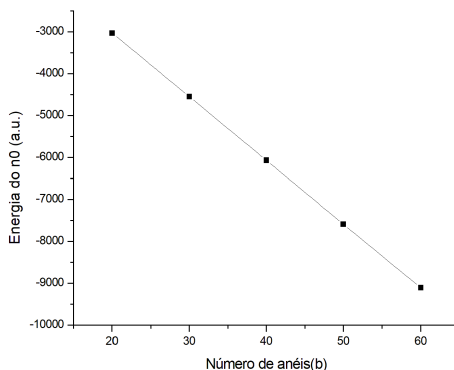


Figura 22: Comportamento dos n0.
Fonte: O autor.

Com isso, verificamos que quanto menor o número de benzenos maior a energia do sistema, ou seja, menos estável. É que esse nível obedece um padrão, que pode ser descrita através da seguinte equação:

$$E(0, b_i) = \frac{b_i}{b_j} E(0, b_j) \quad (66)$$

onde a $E(0, b_i)$ é a energia de um determinado número de benzenos que queremos descobrir sem nenhuma torção, $E(0, b_j)$ é a energia de um determinado número de benzenos que já conhecemos (também sem nenhuma torção) o resultado, e b_i e b_j são, respectivamente, o número de benzenos da faixa que queremos descobrir e o número de benzenos que já conhecemos (tomando como exemplo as faixas de 30 e 60 benzenos, a b60 é duas vezes o valor da b30). Porém, quando observamos individualmente os gráficos para os diferentes tamanhos de faixa variando o número de torções, visualizamos que o comportamento não é constante como mostrado na Figura 22, mas sim apresenta uma leve inclinação positiva com o aumento do número de torções, ficando cada vez menos negativa, conforme visto na Figura 23.

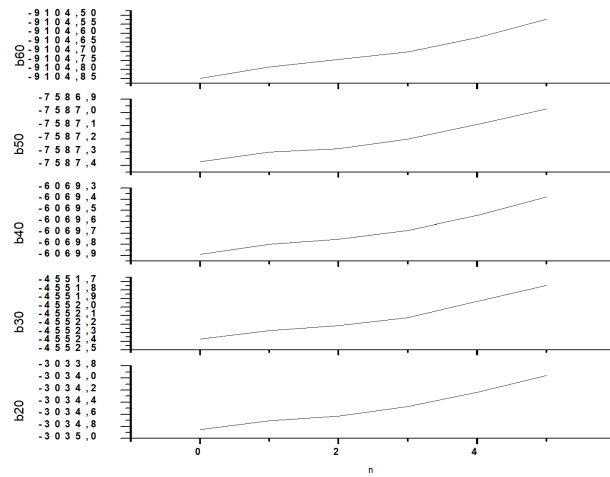


Figura 23: Energia como função do número de torções(n) separados por tamanho de faixa.
 Fonte: O autor.

Sendo assim, realizamos uma aproximação linear (Figura 24), podemos descrever a Energia de um determinado número de torções n e um número de anéis de benzeno b pela expressão $E(n, b) = \alpha + \beta n$. Onde $\alpha = E(0, b_i) = \frac{b_i}{b_j} E(0, b_j)$, sendo $E(0, b_i)$ e $E(0, b_j)$ respectivamente, o número de benzenos da faixa que queremos descobrir e o número de benzenos que já conhecemos para o cilindro sem torção(n_0), já que elas possuem o comportamento mais linear, como visto na Figura 22.

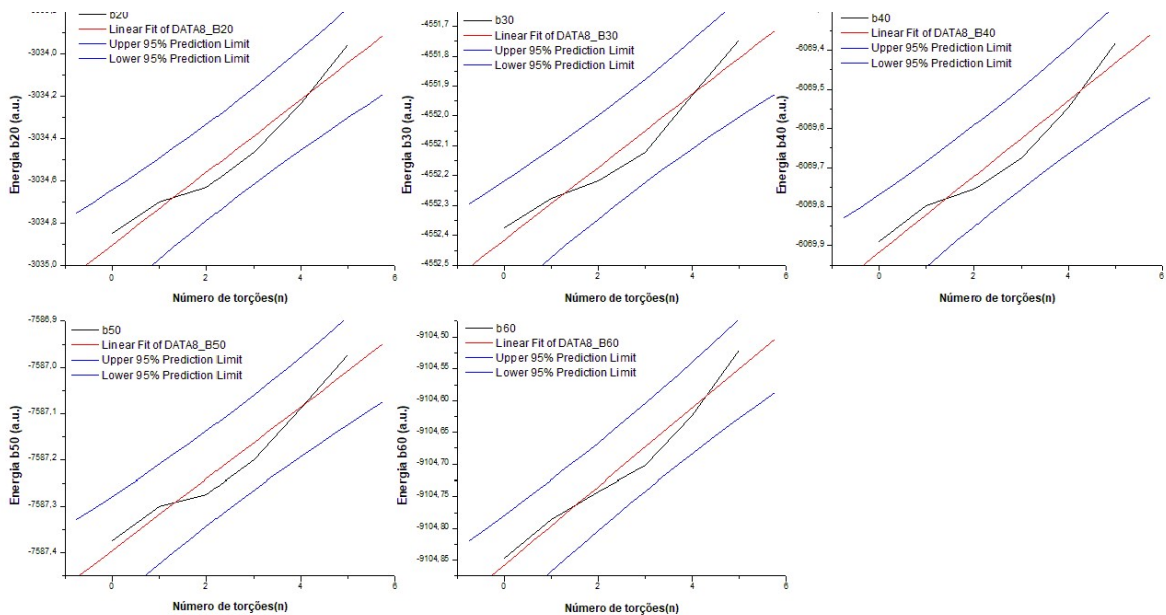


Figura 24: Regressão linear para as faixas b20, b30, b40, b50 e b60.
 Fonte: O autor.

O coeficiente β , que é a variável dependente da equação que representa a energia obtida, com o aumento do tamanho das faixas diminui, conforme pode ser observado na Figura 25. Isso se deve ao fato das faixas estarem sofrendo menos com as tensões induzidas pelas torções (que denotaremos a partir deste ponto como TIT).

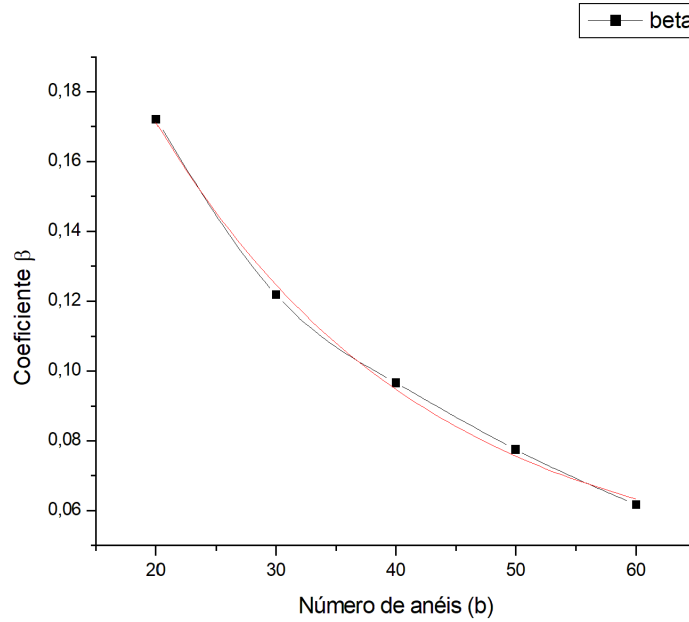


Figura 25: Coeficiente β como função do Número de anéis de benzeno (b).
Fonte: O autor.

Devido ao fato do β diminuir exponencialmente quanto maior for o número de anéis de benzeno, tendo em vista que quanto menor o número de anéis maior a dificuldade de se torcer a superfície, aplicamos uma regressão exponencial e obtivemos como expressão o seguinte termo dependente do número de anéis de benzeno (b):

$$\beta = Y_0 + Ae^{\frac{-b}{t}} \quad (67)$$

tendo como valores constantes $Y_0=0,0415$, $A=0,31579$ e $t=22,47082$. Sendo assim, a formula que melhor prevê os valores de energia $E(n,b)$ para diferentes quantidades de torção n e número de anéis b é:

$$E(n, b_i) = \frac{b_i}{b_j} E(0, b_j) + (Y_0 + Ae^{\frac{-b_i}{t}})n \quad (68)$$

Outro ponto que nos permite observar esta diminuição da TIT conforme

aumentamos o tamanho da faixa é que existe uma diminuição na diferença entre as energias do n_0 ao n_5 (ΔE_n) com o aumento do tamanho da faixa (Figura 26). O que mais uma vez nos permite observar que existe uma diminuição na tensão associada a essa torção quanto maior é a faixa. Sendo assim, podemos concluir que quanto menor é o tamanho da faixa maior será a influência das torções na sua energia.

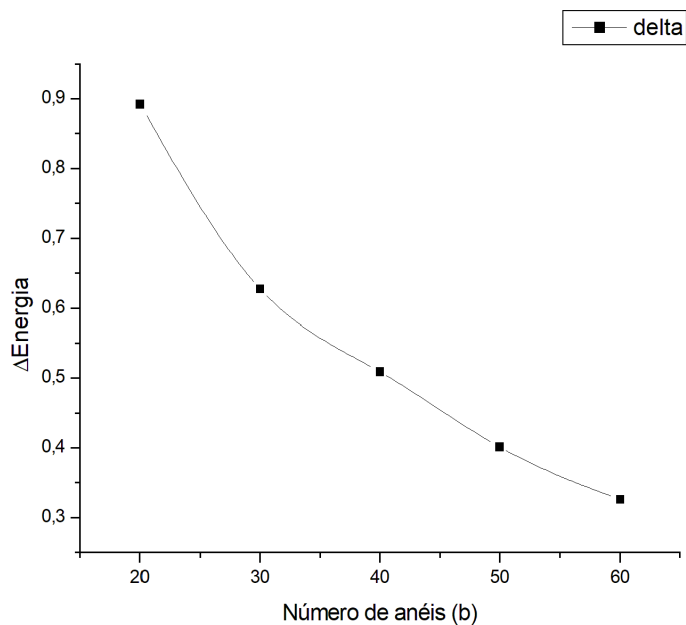


Figura 26: ΔE_n como função do Número de anéis de benzeno (b).
Fonte: O autor.

Ainda avaliando as energias dos sistemas, decidimos verificar o comportamento a partir de uma outra base. Utilizando a Hartree-Fock (HF), verificamos conforme gráfico a seguir (Figura 27) que o comportamento crescente com o aumento das torções e o comportamento linear conforme o aumento do tamanho da faixa se mantiveram para essa nova base.

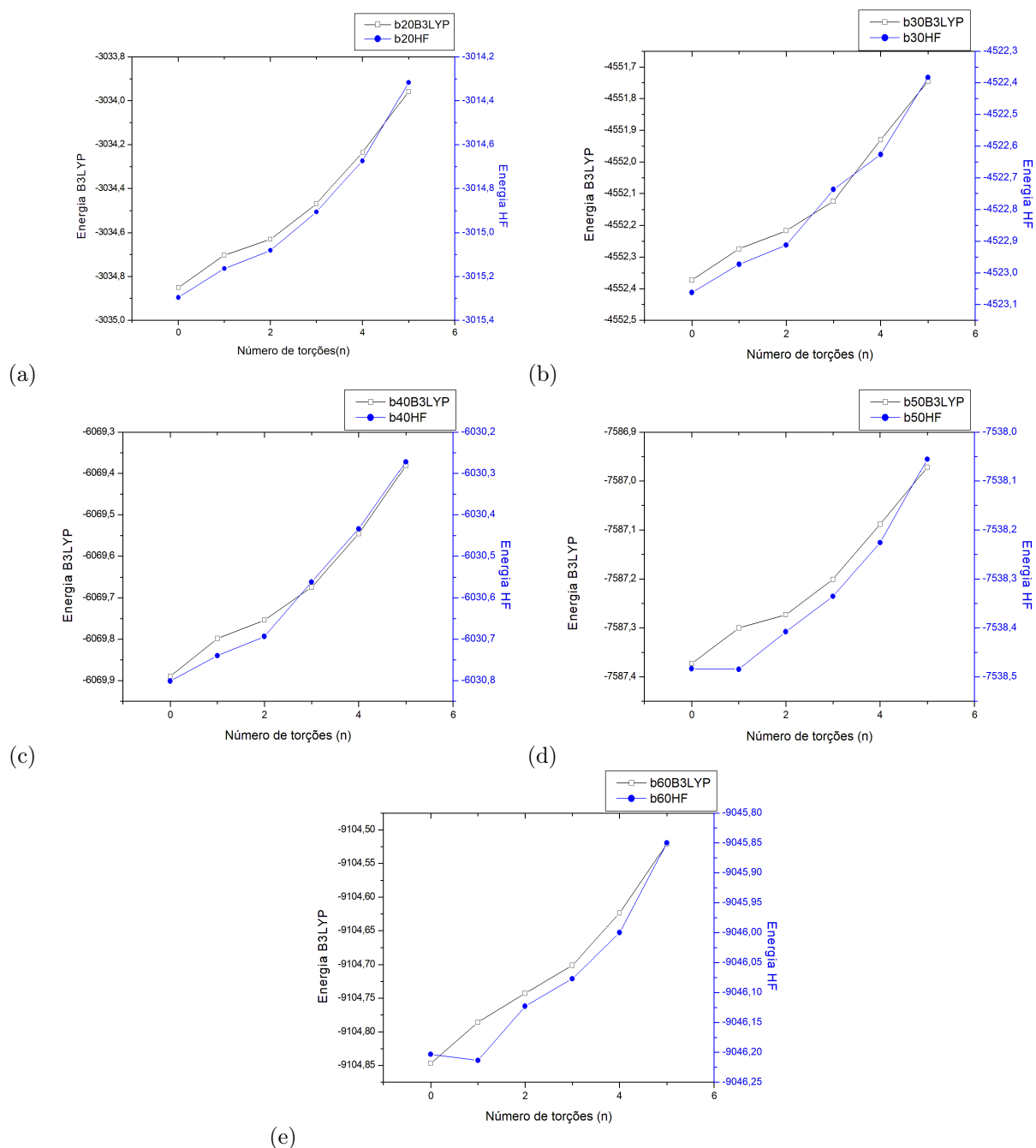


Figura 27: Faixas (a)b20n0, (b)b20n1, (c)b20n2, (d)b60n0, (e)b60n1 e (f)b60n2.

Fonte: O autor.

Além disso, a variação entre o último entre a energia do n0 e o n5 para o HF também apresentam o mesmo comportamento B3LYP, isto é, uma queda exponencial conforme aumentamos o número da faixa, que indica que a influência do número de torções cada vez menor conforme aumentamos o tamanho da faixa.

Tabela 1: Diferença entre as energias B3LYP e HF pelo tamanho da faixa

	Δ_{nvel20}	Δ_{nvel30}	Δ_{nvel40}	Δ_{nvel50}	Δ_{nvel60}
0	19,5541	29,3109	39,0889	48,8896	58,6439
1	19,5388	29,3012	39,0583	48,8155	58,5721
2	19,5489	29,3048	39,0606	48,8653	58,6198
3	19,5632	29,3859	39,1126	48,8653	58,6244
4	19,5616	29,3035	39,1123	48,8623	58,6237
5	19,6410	29,3627	39,1092	48,9164	58,6712

Fonte: O autor.

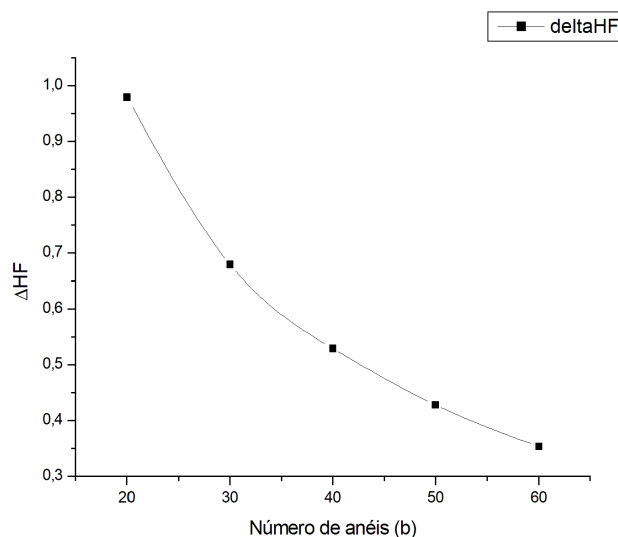


Figura 28: Δ_{HF} como função do Número de anéis de benzeno (b).

Fonte: O autor.

Porém, apesar de verificar que o comportamento geral é mantido, podemos ver que existem algumas diferenças entre a energia do B3LYP e a do HF. Observando essa diferença entre os dois cálculos (Tabela 1), constatamos que com o aumento do tamanho da faixa houve também um aumento da diferença entre as duas energias. Portanto quanto menor for a faixa mais próximos serão os resultados obtidos a partir dos dois métodos.

5.2.2 Densidade de carga

É de extrema importância estudar a distribuição de densidade de carga por meio da análise de população de Mulliken de cada átomo de Carbono e Hidrogênio do sistema para determinar as variações nas propriedades eletrônicas (LEE et. al., 2019). O primeiro ponto a se destacar é que os valores das cargas não variam, de modo considerável, com o aumento do tamanho da faixa. Sendo assim temos

apenas as variações relacionadas ao aumento de número de torções.

Para n_0 , os valores das cargas permanecem iguais por toda a extensão faixa, o que é esperado já que a molécula é regular. Como podemos observar na Figura 29, onde as cargas positivas são representadas na cor verde enquanto as negativas são representadas em vermelho, os Ci apresentam praticamente neutralidade de carga (cor mais escura representando o centro da escala). Os Hidrogênios funcionam como uma espécie de carga positiva de compensação conectados aos átomos Ce.

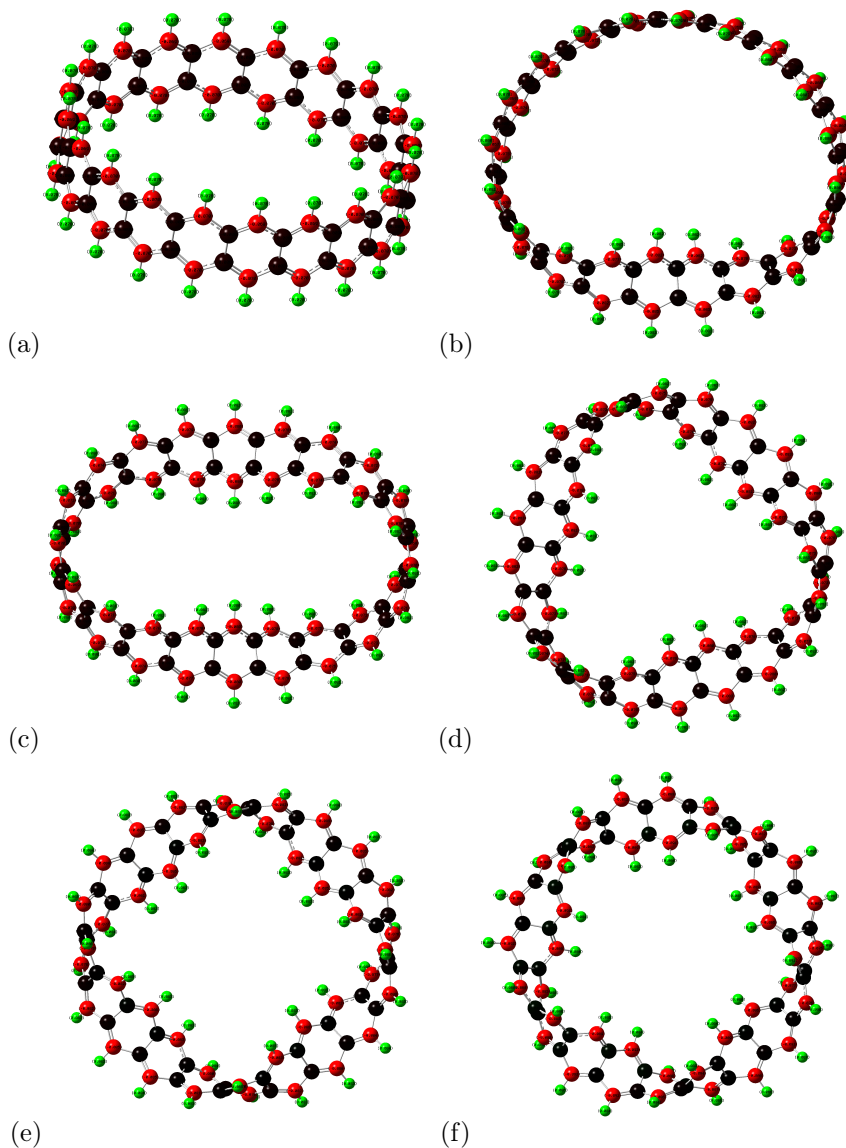


Figura 29: Cargas de Mulliken para as faixas (a) n_0 , (b) n_1 , (c) n_2 , (d) n_3 , (e) n_4 e (f) n_5 .
Fonte: O autor.

Para os outros valores podemos observar uma leve variação que aumenta gra-

dativamente a carga (Carbonos mais negativos e Hidrogênios mais positivos) ao se aproximar da torção. Logo, podemos concluir que as cargas se concentram na torção. Além disso, também é possível observar que os Carbonos e Hidrogênios que ficam voltados para a parte mais externa da região torcida da faixa tem valores levemente maiores que os voltados para dentro na mesma região.

5.2.3 HOMO-LUMO

Nessa seção analisaremos os resultados das energias do HOMO e do LUMO para as moléculas, verificando seu comportamento com o aumento de tamanho da faixa e do número de torções. Os resultados obtidos estão apresentados nas Figuras 30 e 31 abaixo:

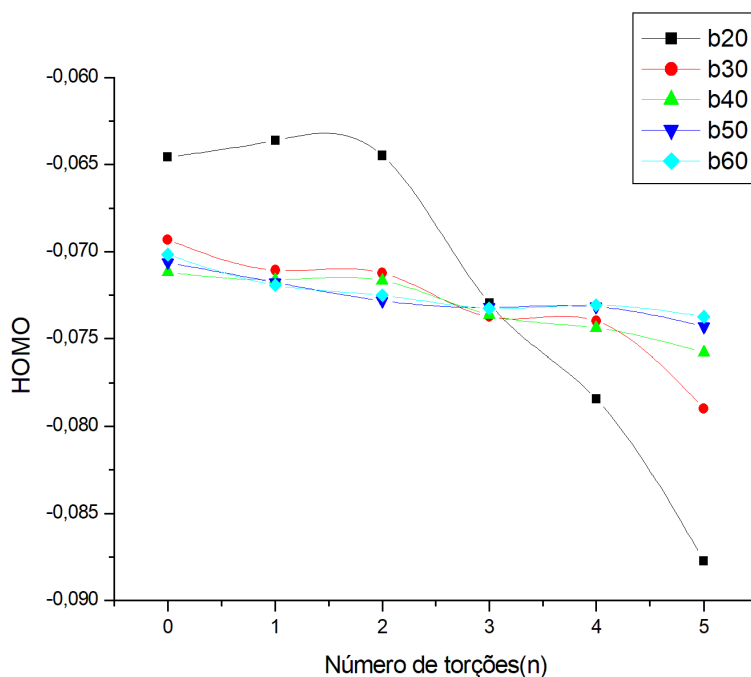


Figura 30: HOMO.

Fonte: O autor.

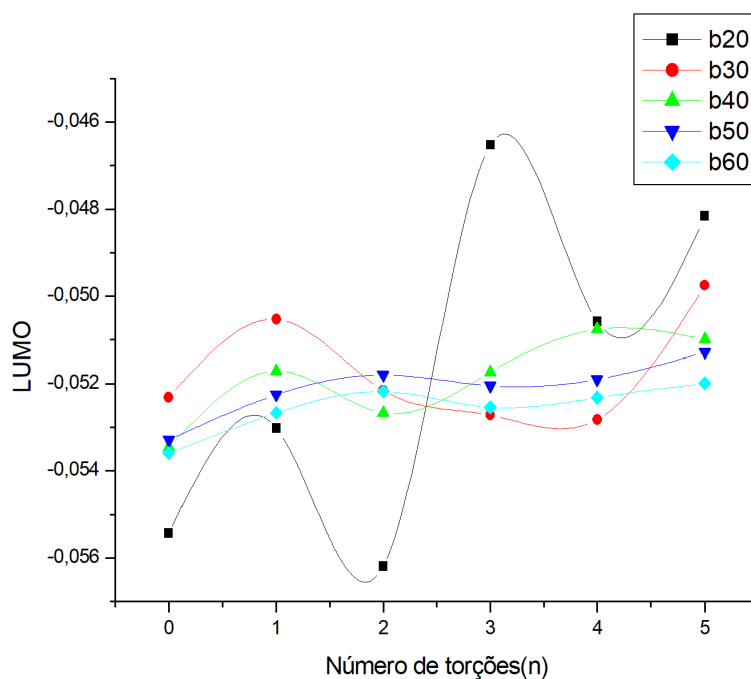


Figura 31: LUMO.
Fonte: O autor.

É possível observar que quanto menor a faixa maior a influencia no HOMO e no LUMO, visto que os valores para as faixas de maior raio quase não variam. Para as faixas de maior variação, como a de 20 anéis, podemos perceber que a medida que aumentamos o número de torções ocorre uma queda nos valores do HOMO e um aumento para os valores do LUMO, o que indica uma diminuição na reatividade da molécula, de acordo com Ahmed, Islam e Ahmed (2023). Sendo assim, para as moléculas muito pequenas, quanto maior for o número de torções menor será a sua reatividade, que está associada ao estresse induzido pela tensão (TIT).

Com os valores do HOMO e do LUMO em mãos, podemos determinar o gap HOMO-LUMO (Figura 32), ou seja, a variação da energia do último orbital ocupado para o primeiro orbital desocupado, que vai indicar a condutividade da molécula.

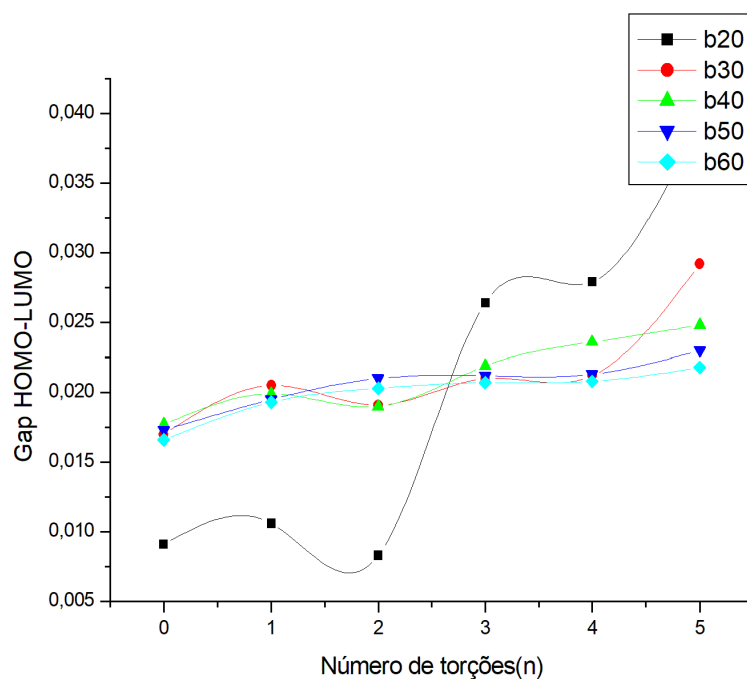


Figura 32: Gap HOMO-LUMO.
Fonte: O autor.

Assim como nos resultados do HOMO e do LUMO, o gap apenas apresentou variações significativas quanto menor for a faixa. Observando novamente o b20, podemos verificar que o aumento do número de torções aumenta significativamente o gap, o que indica que a estrutura sai de um comportamento de semicondutor para um mais isolante, dado que a condutividade elétrica (σ) está relacionada, através da equação de Arrhenius ($\sigma \propto e^{-\frac{E_g}{2kT}}$), proporcionalmente ao gap de energia (AHMED; ISLAM; AHMED, 2023).

5.2.4 Dureza absoluta (η), Eletroafinidade (ω) e Eletronegatividade (χ)

Avaliando a Dureza absoluta (η), percebemos que ela segue os padrões que encontramos para o HOMO e LUMO, o que já é esperado visto que esta propriedade deriva das duas propriedades anteriores. Percebemos então que quanto maior o tamanho da faixa menor é a variação entre os níveis de dureza conforme aumentamos o número de torções. Porém para pequenos tamanhos de faixa temos uma influência na propriedade.

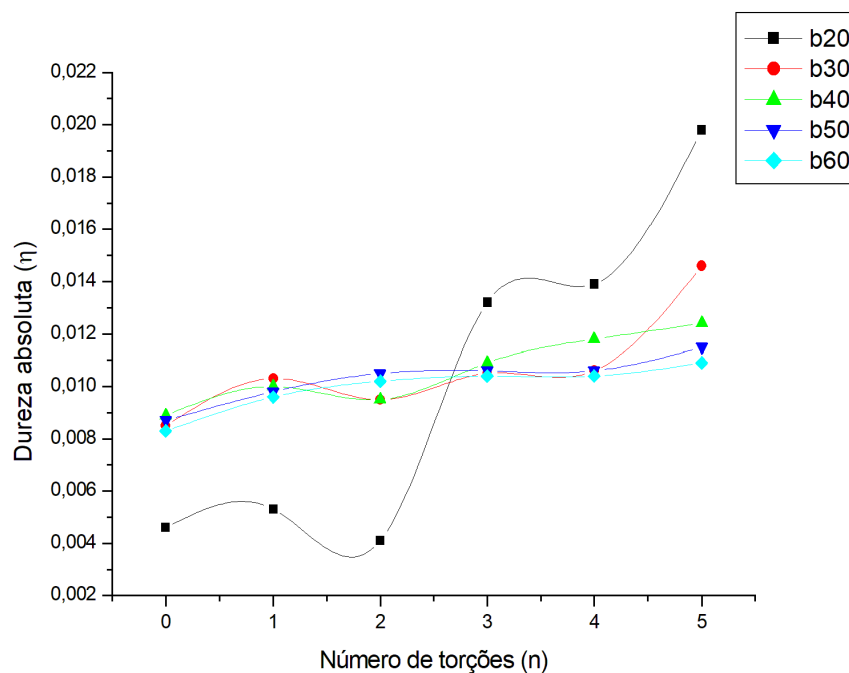


Figura 33: Dureza absoluta como função do número de torções.
 Fonte: O autor.

Moléculas com dureza elevada tendem a ter o maior GAP, e quanto maior for o seu valor menor é a reatividade química e maior é a estabilidade química do sistema, de acordo com Ahmed, Islam e Ahmed (2023) e Zhiani, Razavipanah e Emrani (2018). Sendo assim, para as faixas muito pequenas, quanto menor for o número de torções maior será sua estabilidade e maior a sua reatividade. O comportamento apresentado pela Eletroafinidade (ω), conforme o gráfico da Figura 34, se mostra similar ao observado nos gráficos de dureza visto que quanto maior for a eletroafinidade maior será reatividade e a estabilidade da molécula.

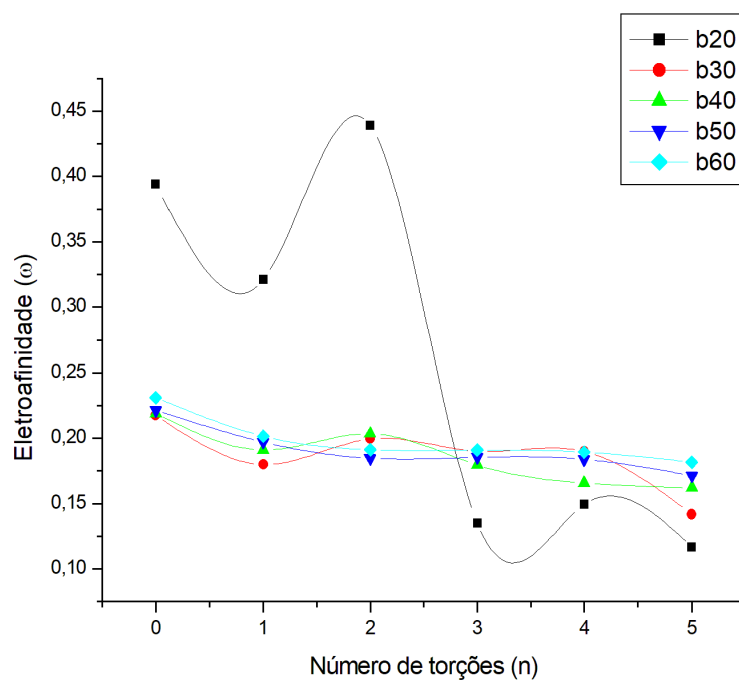


Figura 34: Eletroafinidade como função do número de torções.
 Fonte: O autor.

Observando a eletronegatividade (χ) do sistema, ela se mantém praticamente invariante em função do número de torções e do tamanho da faixa como as demais propriedades, conforme também demonstrado por (BASTOS; DA SILVA; SANTOS, 2014). Porém para valores menores de B conseguimos observar uma variação, o que indica que essa tensão associada à torção induzida pela torção (TIT), que se torna maior quanto menor for o tamanho da faixa, também influencia nessa propriedade.

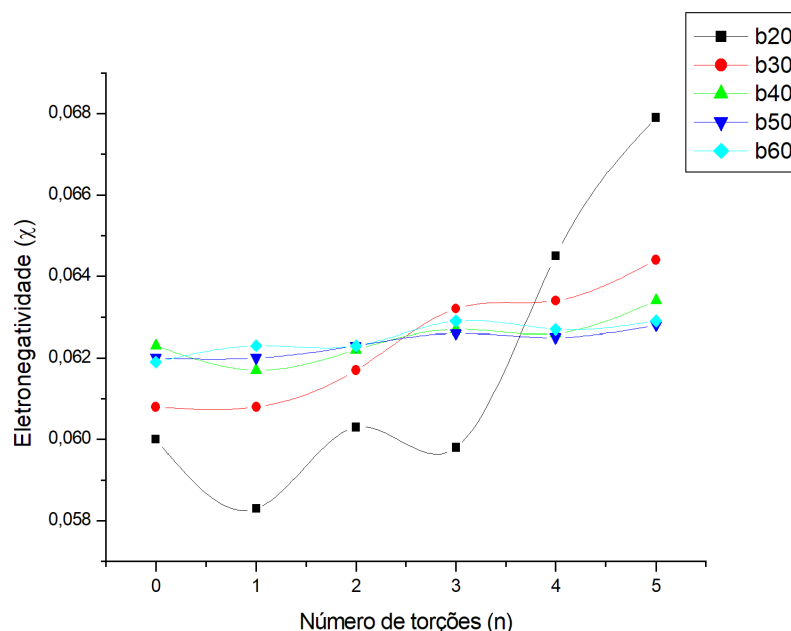


Figura 35: Eletronegatividade como função do Número de torções.
Fonte: O autor.

5.2.5 Densidade de Estados

O primeiro ponto a se observar quando avaliamos os resultados computacionais das Densidades de Estado (DOS) dos sistemas estudados é que quando fixamos o tamanho da faixa e aumentamos o número de torções, a densidade de estados é praticamente invariante para as faixas maiores (b40 e b60), porem variam bastante para a b20, como podemos observar na Figura 36. Menores densidades de estados próximos ao nível de Fermi aparecem quanto menor o tamanho da faixa, o que significa que poucos elétrons de valência ocupam os níveis mais altos. Os elétrons na banda de valência raramente podem transitar para a banda de condução, logo quanto menor a faixa menor a condutividade, conforme descrito por Dai, Zhang e Zhao (2003) e Zhao e Dai (2004).

Além disso podemos observar na faixa menor, que quanto maior o número de torções da faixa mais a densidade de estados no nível de Fermi tende a zero. O que representa que ela vai se tornando cada vez menos condutora. Estes resultados estão em concordância com os dados obtidos com os gaps na seção anterior, onde os valores do gap para as faixas maiores ficam num nível intermediário para todas as torções, enquanto que para a faixa menor os menores valores de torção são mais condutores que as faixas maiores, e os valores maiores de torção são menos condutores que os das faixas maiores.

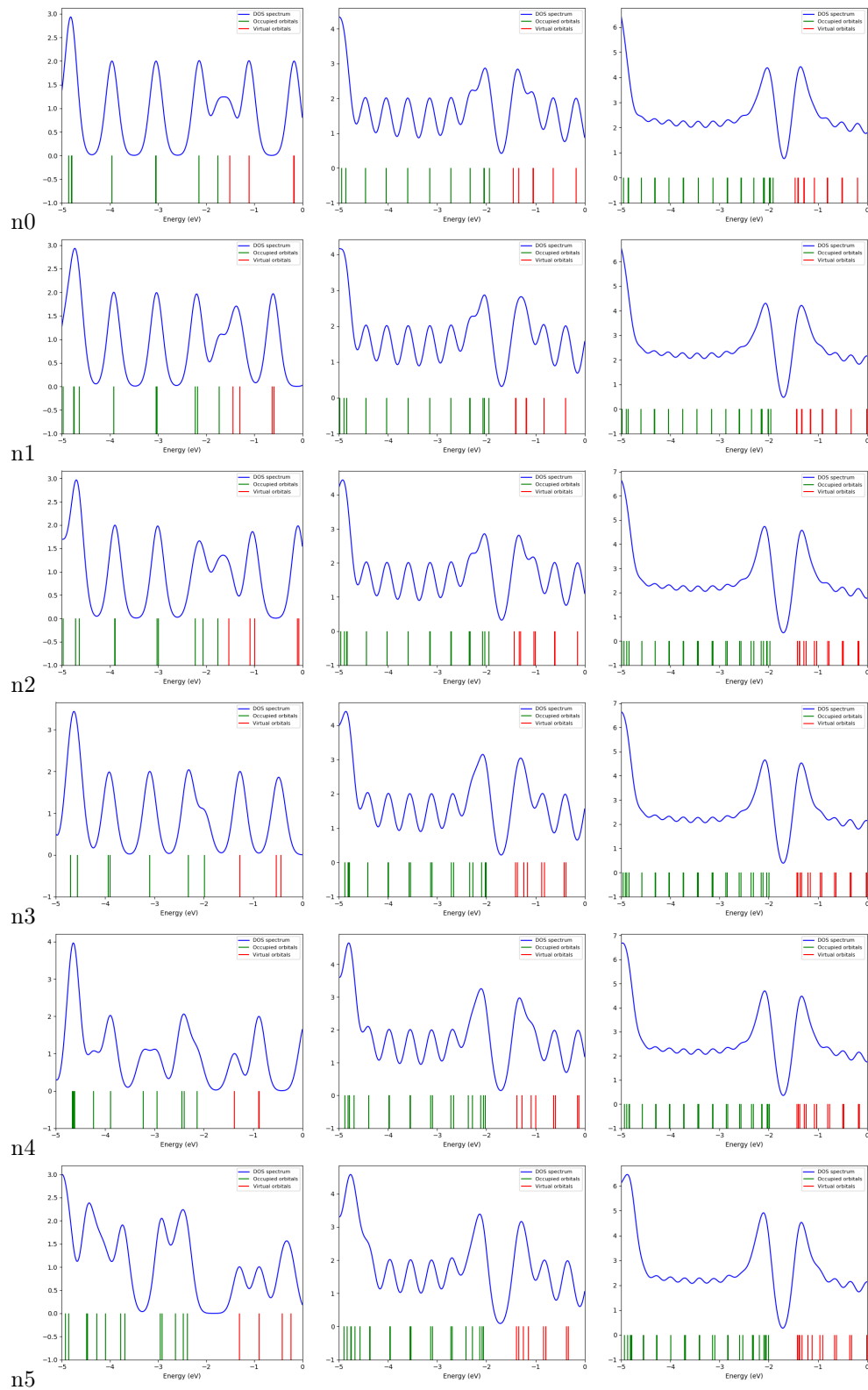


Figura 36: Densidade de estados para o b_{20} (coluna da esquerda), b_{40} (coluna do meio) e b_{60} (coluna da direita).

Fonte: O autor.

5.2.6 Simetrias

Neste t3pico, apresentamos os resultados obtidos atraves da quebra da simetria entre as tor37es. Como o sistema mais simetrico de menor n3mero de tor373o 3e o de duas tor37es (n_2), decidimos analisar a influencia da distancia entre as tor37es e como esta assimetria modifica os sistemas estudados. Normalmente nas faixas com duas tor37es, temos que as tor37es est3o paralelas, por3m, nas faixas assimetricas de duas tor37es (Figura 37) temos que a distancia em uma das regi3es n3o torcidas aumenta em rela33o a outra.

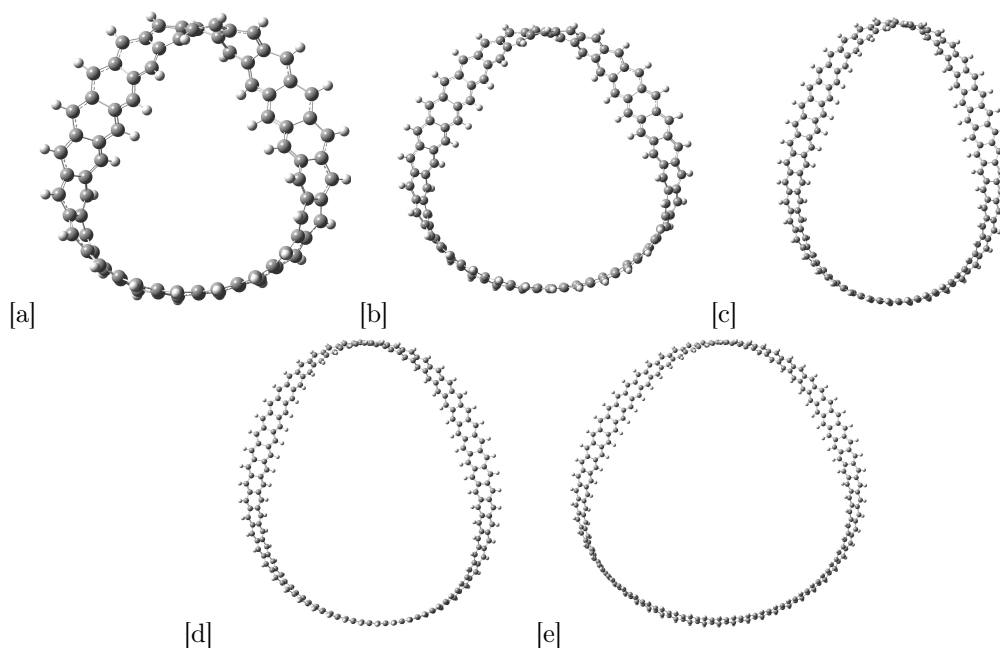


Figura 37: Mol3culas com duas tor37es sem simetria para a) b20, b) b30, c) b40, d) b50 e e) b60.
Fonte: O autor.

Realizamos o calculo computacional para determinar as energias dos novos sistemas sem simetria, a fim de comparar com os resultados obtidos anteriormente para os sistemas simetricos. Com isso, foi possivel perceber que existem diferen3as entre os dois tipos de sistema (Tabela 2).

Tabela 2: Energias para os sistemas com e sem simetria

	2_normal	2_simm	Δ_{ns}
20	-3.034,6301	-3.034,2508	-0,3794
30	-4.552,2167	-4.551,7803	-0,4364
40	-6.069,7540	-6.069,2693	-0,4846
50	-7.587,2730	-7.586,7091	-0,5638
60	-9.104,7428	-9.104,1595	-0,5833

Conforme observado na Tabela 2, vemos que os sistemas simetricos apresentam, para todos os casos, energia mais negativas, não importando o tamanho da faixa. E, portanto, quanto mais simetricas são as faixas mais estáveis elas serão. Além disso, de acordo com o Δ_{na} (variação entre a energia do normal e do assimetrico), quanto maior o tamanho da faixa maior será a diferença entre as energias dos sistemas simetricos em relação aos não simetricos. Logo, para os sistemas maiores a influencia dessa simetria é maior.

Também foi possível notar uma mudança significativa nas localizações das regiões onde as cargas se concentram. Conforme mencionado na sessão 5.2.2, temos valores levemente maiores conforme nos aproximamos da torção e que ela apresenta um valor igualmente suavemente maior nos atomos voltados para a parte exterior da faixa, para os sistemas simetricos. Esse comportamento fica ainda mais evidente quando alteramos a simetria da molecula, conforme podemos observar na Figura 38. Sendo assim, ao aproximarmos as torções em uma faixa podemos deslocar a densidade de cargas na direção em que essa distancia diminui.

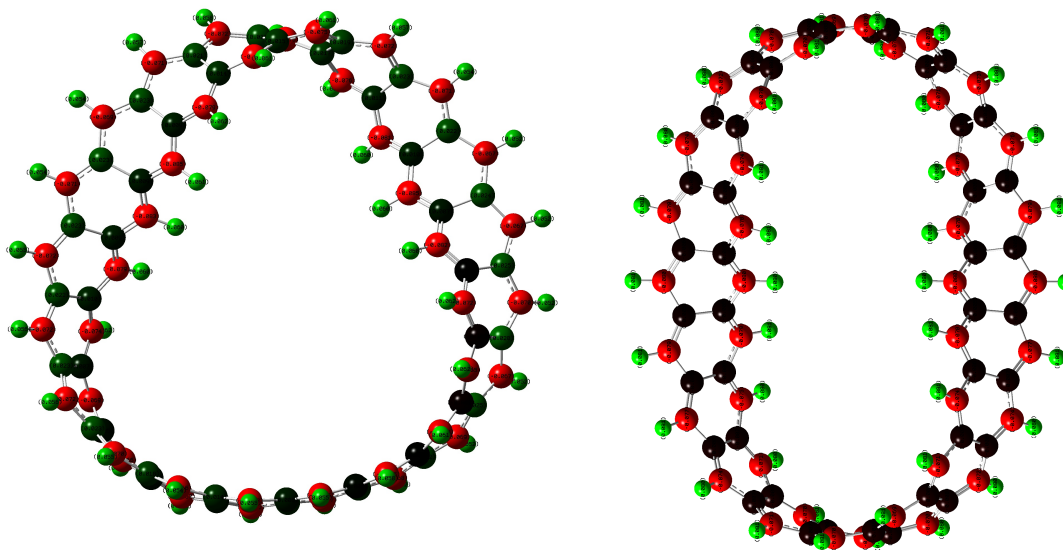


Figura 38: Cargas para as moléculas com duas torções com e sem simetria.
Fonte: O autor.

Por fim, neste topico, buscamos comparar as Densidades de Estados entre os simetricos e os assimetricos para verificarmos o seu comportamento. A partir dos gráficos (Figura 39), podemos visualizar que, assim como nos simetricos, os assimetricos também aumentam o Gap entre a banda de valência e a a banda de condução, porém esse aumento é consideravelmente menor para os sistemas sem simetria. Logo, o variação da condutividade é muito menor nos sistemas

assimetricos.

Ainda de acordo com o observado na Figura 39, menores densidades de estados próximos ao nível de Fermi aparecem quanto menor o tamanho da faixa, logo quanto menor a faixa menor a condutividade, assim como para os simetricos. Porem os valores para o assimetrico são menores qe os valores para o sistema simetrico, o que tambem serve para indicar uma menor condutividade. E, para os sistemas assimetricos a variação da densidade no nivel de Fermi é muito pequena, o que indica uma maior constancia nos valores da condutividade, quando comparado com os simetricos. Portanto, as faixas assimetricas possuem baixa condutividade e essa propriedade é praticamente invariante, mesmo com o aumento do tamanho da faixa.

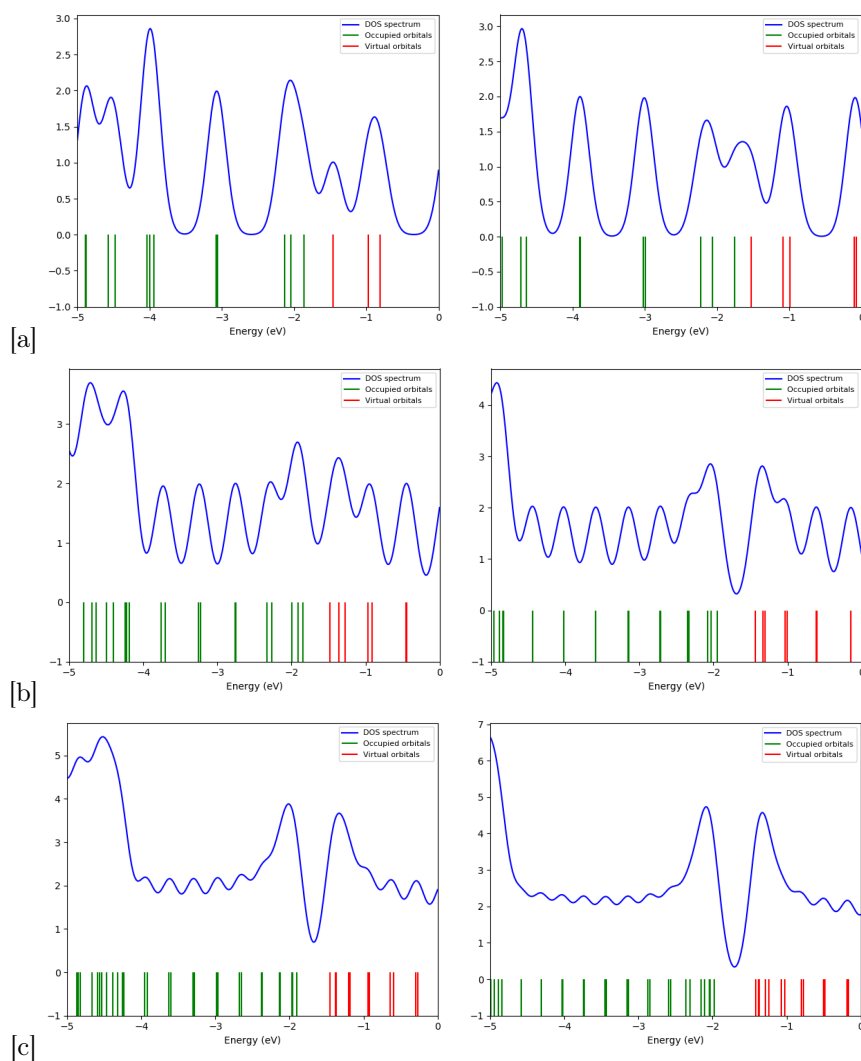


Figura 39: Comparação das Densidade de Estados para as moléculas com (direita) e sem simetria (esquerda) a) b20, b) b40 e c) b60.

Fonte: O autor.

5.2.7 Substituições

Por fim, nesta última sessão, buscamos verificar os efeitos das substituições nas faixas, relacionando o aumento de torção e do tamanho da faixa. Os substituintes foram escolhidos utilizados como critério grupos ativantes e desativantes de anéis aromáticos fortes e fracos. Sendo: NH_2 fortemente ativante, CH_3 fracamente ativante, Cl fracamente desativante e NO_2 fortemente desativante, conforme descrito por (SANTOS, 2019).

Com os substituintes definidos, partimos para a modelagem da molécula. Foram escolhidos para a verificação da influência destes grupos nos anéis a faixa com 20 anéis de benzeno, uma vez que ela é a que apresentou as maiores variações das propriedades conforme o aumento do número de torções. Além disso, foram modeladas com as substituições dentro e fora na torção, e, nesta última verificamos também a substituição no hidrogênio interno ou externo, conforme a imagem abaixo (Figura 40).

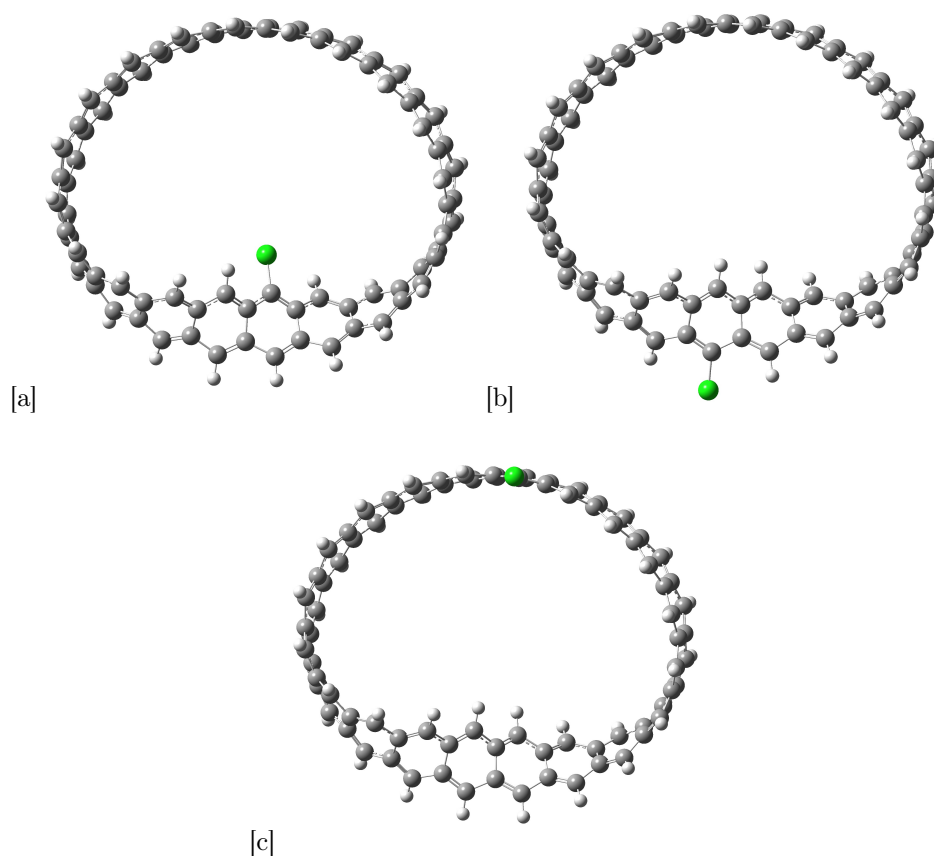


Figura 40: Substituição na molécula por Cl na posição a) Dentro da torção na parte interna, b) Dentro da torção na parte externa e c) Fora da torção.

Fonte: O autor.

Realizando o calculo computacional destas moléculas substituídas, foi possível observar que o comportamento das energias com o aumento do número de torções se manteve igualmente crescente assim como nas faixas sem substituição.

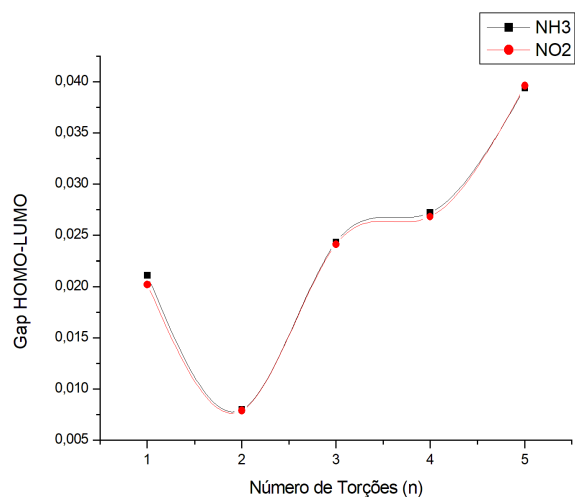
Por fim, nesta última sessão, buscamos verificar os efeitos das substituições nas faixas, relacionando o aumento de torção e do tamanho da faixa. Os substituintes foram escolhidos utilizados como critério grupos ativantes e desativantes de anéis aromáticos fortes e fracos. Sendo: NH_2 fortemente ativante, CH_3 fracamente ativante, NO_2 fortemente desativante e Cl fracamente desativante, conforme descrito por Santos (2019). Para os casos do CH_3 , Cl e NO_2 , foi observado que as energias são mais negativas, ou seja, o sistema é mais estável quando a substituição ocorre na região da torção no átomo externo (onde temos uma maior carga de elétrons). Apenas o NH_2 se mostrou mais estável quando substituído numa região mais deficitária de carga (região externa a torção), como observado na Tabela 3.

Tabela 3: Energias das Substituições por NH₂, CH₃, Cl e NO₂ nas regiões internas, externas e fora da torção

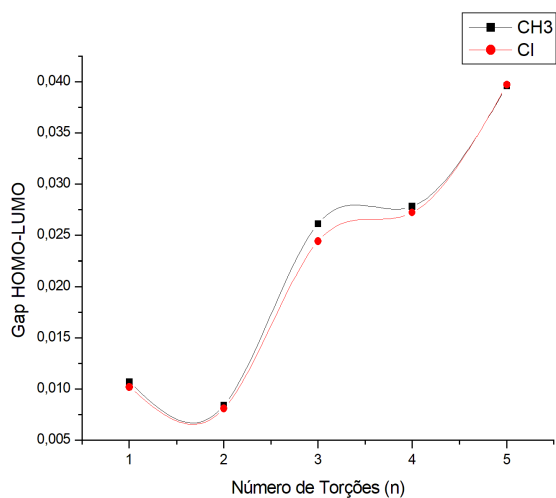
	n	Interno	Externo	Fora
NH₂	1	-3.089,3036	-3.089,3027	-3.089,3273
	2	-3.089,2288	-3.089,2287	-3.089,2446
	3	-3.089,0850	-3.089,0675	-3.089,0836
	4	-3.088,8362	-3.088,8386	-3.088,8522
	5	-3.088,5725	-3.088,5573	-3.088,5742
CH₃	1	-3.073,5514	-3.073,5517	-3.073,5459
	2	-3.073,4773	-3.073,4783	-3.073,4757
	3	-3.073,3164	-3.073,3176	-3.073,3158
	4	-3.073,0857	-3.073,0869	-3.073,0853
	5	-3.072,8081	-3.072,8082	-3.072,8071
Cl	1	-3.049,0422	-3.049,0433	-3.049,0380
	2	-3.048,9693	-3.048,9696	-3.048,9658
	3	-3.048,8076	-3.048,8081	-3.048,8054
	4	-3.048,5754	-3.048,5770	-3.048,5742
	5	-3.048,2994	-3.048,2990	-3.048,2981
NO₂	1	-3.235,9876	-3.236,0156	-3.235,9905
	2	-3.236,2487	-3.236,2515	-3.236,2436
	3	-3.236,0881	-3.236,0911	-3.236,0854
	4	-3.235,8586	-3.235,8614	-3.235,8568
	5	-3.235,5835	-32.355,8283	-3.235,5822

Fonte: O autor.

Por ultimo, de posse dos resultados obtidos para o HOMO e para o LUMO, observamos pouca variação no Gap HOMO-LUMO entre os locais onde cada substituição aconteceu. Logo, a condutividade do sistema independe se a substituição ocorreu dentro ou fora da torção, ou se foi no átomo externo ou interno. Os valores para o Gap dos substituintes do tipo fortemente ativadores e desativadores observados foram maiores que os fracamente ativadores e desativadores. Sendo assim, verificamos através de gráficos (Figura 41) quais apresentavam maiores valores de condutividade.



[a]



[b]

Figura 41: Comparação entre os Gaps HOMO-LUMO de substituintes a) Fortemente Ativadores e Desativadores e b) Fracamente Ativadores e Desativadores.

Fonte: O autor.

No geral, para as substituições, a gente pode concluir que os ativadores vão ter gaps maiores do que os desativadores, e, em comparação entre forte e fraco, um ativador forte vai ter um GAP maior que um ativador fraco e um desativador forte vai ter GAP maior que um desativador fraco.

$$Gap_{Cl} < Gap_{CH_3} < Gap_{NO_2} < Gap_{NH_2}$$

Ou seja, a fim de potencializar o efeito de condução dos sistemas com torção, o ideal é que seja substituído com um desativador fraco, porque quanto mais fracamente desativador menor vai ser o GAP, com base nos substituintes estudados.

Conclusões

Neste trabalho, obtivemos, por meio do formalismo de Da Costa, que o potencial associado às curvaturas Média e Gaussiana associadas a superfícies do tipo faixa de Möbius, com o aumento do número de torções para faixas menores sofria um aumento da tensão associada a essa torção e que essa propriedade esta diretamente ligada às propriedades físico-químicas de nanoestruturas que se comportam como essas faixas.

Realizamos um estudo sobre o comportamento da energia, e com isso foi possível determinar que quanto menor o número de benzenos maior instabilidade da molecula, assim com quanto maior o número de torções, que concorda com os resultados obtidos do potencial geometrico, e nos permite determinar energias para sistemas que se comportam da mesma maneira, a partir da formula que foi determinada que relaciona essa energia com o número de torções e o número de anéis de benzeno na faixa. Paralelo a isso, verificamos o comportamento desse mesmo sistema utilizando uma outra base para calcular, e tivemos como resultado geral que o comportamento observado no primeiro metodo se manteve, porem quanto maior fosse o sistema calculado, menor seria a diferença entre os metodos, já que os metodos ab initio (como o HF) são menos eficazes conforme o aumento do número de elementos na molecula estudada.

Para as propriedades eletronicas foi possivel verificar que temos valores levemente maiores conforme nos aproximamos região onde se encontra a torção e esse valor é maior nos atomos voltados para a parte exterior da faixa. Além disso, atraves do HOMO e do LUMO, podemos verificar que o aumento do número de torções aumenta significativamente o gap, porem apenas para sistemas muito pequenos (onde o aumento do número de torções faz com que o comportamento da molecula passe de semiconductor para um mais isolante). Assim como a reatividade da molecula, se mantem praticamente invariante para faixas maiores, porem quanto maior numero de torções para faixas pequenas menos reativo ele é.

Por fim, comparamos os estudos realizados nas nossas estruturas do tipo faixa de Möbius quanto a simetria entre as torções, onde verificamos que quanto mais simetricas são as faixas mais estáveis elas serão e são mais condutivas quando comparadas a faixas assimetricas; E quanto as substituições, observamos que o comportamento das energias se manteve proximo ao da faixa sem substituição e que para todos os sistemas a energia se mantem mais negativa (molecula mais

estavel) quando esta substituição ocorre dentro da região da torção nos átomos voltados para a parte externa, com exceção do NH₂, que apresentou maior estabilidade na parte sem torção da faixa. E que os substituintes ativadores vão ter gaps maiores do que os desativadores, e um ativador forte vai ter um Gap maior que um ativador fraco e um desativador forte vai ter Gap maior que um desativador fraco. Porém, devido as limitações de disponibilidade de tempo computacional esta última etapa necessita de um olhar mais adequado para o funcionamento dessas substituições.

Desta forma, podemos concluir que a medida em que o tamanho de uma faixa diminui, maiores serão as variações nas propriedades diminuindo a sua estabilidade, sua condutividade e sua reatividade quanto maior for o número de torções. E que para as faixas maiores o aumento das torções pouco influenciam, dado que elas não exercem tensão/estresse suficiente nas estruturas quanto maior o seu raio.

Sendo assim, como perspectivas futuras para essa monografia, buscaremos estudar um maior número de variações de estruturas do tipo Möbius e maiores quantidades de torções a fim de investigar os limites das torções em faixas. Além disso, iremos incrementar o número de substituintes calculados tanto ativadores quanto desativadores, além de observar outras características desses substituintes (como propriedades ópticas e vibracionais), buscando entender o efeito desses substituintes nas propriedades das moléculas com torção.

Referências

- AHMED, M. T.; ISLAM, S.; AHMED, F. Structural, optical, and electronic properties of boron nitride incorporated Mobius carbon nanoribbon: a DFT calculation. *Phys. Scr.* 98035827. 2023 . DOI 10.1088/1402-4896/acbb36
- ATANASOV, V.; DANDOLAFF, R.; SAXENA, A. Geometry-induced charge separation on a helicoidal ribbon. *Phys. Rev. B* 79, 033404– Published 12 January 2009
- BASTOS, C. C. Ressonância não-sincronizada em supercondutores. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Química Fundamental– Recife. 2012.
- BASTOS, C. C.; DA SILVA, L. C. B.; SANTOS, F. Semi-empirical and *ab initio* calculations for twisted Möbius strips molecular models. 2014. XIII Encontro da Sociedade Brasileira de Pesquisa em Materiais At: João Pessoa, Brazil Volume: Anais XIII Encontro SBPMat, v. 1, p. 99.
- Bool, F.H. et al. M.C. Escher: His Life and Complete Graphic Work. Amsterdam: Meulenhoff, 1981; English-language edition, New York: Harry N. Abrams, 1982.
- CAPELLE, K. A bird's-eye view of density-functional theory. Review Articles • *Braz. J. Phys.* 36 (4a) • Dec 2006 • <https://doi.org/10.1590/S0103-97332006000700035>.
- CHUNG, J. H.; CHAI, J.D. Electronic Properties of Mobius Cyclacenes Studied by Thermally-Assisted-Occupation Density Functional Theory. *SCIENTIFIC REPORTS*. 2019.
- DA COSTA, R. C. T. Quantum mechanics of a constrained particle. *Phys. Rev. A*, v. 23, p. 1982. DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.23>. 1982.
- DAI, B.; ZHANG, G.; ZHAO, J. A DFT/B3LYP Computational Study of Boron-Nitride Nanotubes. 2003. *Jnl Chinese Chemical Soc*, 50: 525-528. <https://doi.org/10.1002/jccs.200300077>.
- DA SILVA, L. C.B.; BASTOS, C. C.; RIBEIRO, F. G. Quantum mechanics of a constrained particle and the problem of prescribed geometry-induced potential. *Annals of Physics* 379 (2017) 13–33
- DÍAZ SUÁREZ, E. Simulações computacionais de moléculas com aplicações em biociências. Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Depto. de Física dos Materiais e Mecânica. São Paulo, 2015.
- D'yachkov, E.P., D'yachkov, P.N. Influence of Tension and Compression on the Band Structure of Carbon Nanotubes as Probed by the Cylindrical Wave Method. *Russ. J. Inorg. Chem.* 66, 1688–1695 (2021). <https://doi-org.ez19.periodicos.capes.gov.br/10.1134/S0036023621110048>
- JAHANGIRI, L.; PANAH, H. Quantum mechanical treatment of a constrained particle on two dimensional sphere. *Annals of Physics*. Volume 375. 2016. Pages 407-413. ISSN 0003-4916. <https://doi.org/10.1016/j.aop.2016.10.011>.
- KALVODA, T. ; KREJCIRIK, D.; ZHRADOVA, K. Effective quantum dynamics on the Mobius strip. *JOURNAL OF PHYSICS A-MATHEMATICAL AND THEORETICAL*. 2020.

KOWALSKI, K.; REMBIELINSKI, J. On the dynamics of a particle on a cone. *Annals of Physics*. Volume 329. 2013. Pages 146-157. ISSN 0003-4916. <https://doi.org/10.1016/j.aop.2012.10.003>.

LEE, J.H.; KWON, S.H.; KWON, S. et al. Tunable Electronic Properties of Nitrogen and Sulfur Doped Graphene: Density Functional Theory Approach. *Nanomaterials (Basel)*. 2019;9(2):268. Published 2019 Feb 15. doi:10.3390/nano 90202 68

LIU, Q. H.; TANG, L. H.; XUN, D. M. Geometric momentum: The proper momentum for a free particle on a two-dimensional sphere. *Phys. Rev. A* 84, 042101 (2011).

NISHIGAKI, S.; SHIBATA, Y.; NAKAJIMA, A.; OKAJIMA, H.; MASUMOTO, Y.; OSAWA, T.; MURANAKA, A.; SUGIYAMA, H.; HORIKAWA, A.; UEKUSA, H.; KOSHINO, H.; UCHIYAMA, M.; SAKAMOTO, A.; TANAKA, K. *Journal of the American Chemical Society* 2019 141 (38), 14955-14960. DOI: 10.1021/jacs.9b06197

NUSSENZVEIG, H. M. *Curso de Física Básica, 4: Ótica, Relatividade, Física Quântica*. 2. ed. São Paulo:Blucher, 2014.

SÁ, E. R. A.; COSTA, R. K. M.; SILVA, R. S.; SILVA, A. F. S.; COELHO, T. L. S.; LIMA, F. C. A. *Introduction to Computational Quantum Calculations in Ionic and Molecular Systems*. RCT V.6 (2020). ISSN 2447-7028

SANTOS, D. M. Um estudo DFT dos efeitos dos substituintes nas propriedades óptica e eletrônicas do grafeno quantum dots. 2019. 67 f. Dissertação (Mestrado em Ciência e Engenharia de Materiais) - Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, SE, 2019.

SCARDICCHIO, A. Classical and quantum dynamics of a particle constrained on a circle. *Physics Letters A*. Volume 300, Issue 1. 2002. Pages 7-17. ISSN 0375-9601. [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(02\)00690-4](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(02)00690-4).

SILVA FILHO, F. F. Modelos de química quântica aplicados à nanoestruturas. 2018. 45 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Química) - Departamento de Química, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2018. Disponível em: <<https://repository.ufrpe.br/handle/123456789/870>>.

STAROSTIN, E., van der Heijden, G. The shape of a Möbius strip. *Nature Mater* 6, 563–567 (2007). <https://doi.org.ez19.periodicos.capes.gov.br/10.1038/nmat1929>

TENENBLAT, K. *Introdução à geometria diferencial*. São Paulo : Editora Blucher, 2009. E-book. ISBN 9788521215622. Disponível em: <<https://integrada.minha.biblioteca.com.br/books/9788521215622/>> . Acesso em: 01 abr. 2023.

WALBA, D. M.; RICHARDS, R. M.; HALTIWANGER, R. C. Total Synthesis of the First Molecular Möbius Strip. *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 104, No. 11, 1982.

ZHAO, J.; DAI, B.. DFT studies of electro-conductivity of carbon-doped boron nitride nanotube. 2004. *Materials Chemistry and Physics - MATER CHEM PHYS*. 88. 244-249. 10.1016/j.matchemphys.2003.10.018.

ZHIANI, R.; RAZAVIPANAH, I.; EMRANI, S. Functionalized single-walled carbon nanotube for ketamine sensing: DFT and MD studies. *Struct Chem* 29, 1807–1815 (2018). <https://doi.org/10.1007/s11224-018-1160-y>