

Nanotubos de carbono (NTCs) possuem notáveis propriedades estruturais, mecânicas e eletromagnéticas. A água, provavelmente o líquido mais estudado de todos, possui muitas propriedades ainda parcialmente desconhecidas. Entre elas estão aquelas relacionadas ao seu confinamento. A estratégia para evitar a complexidade de sistemas biológicos é empregar os NTCs como modelo para estes, utilizando-os como protótipos para os nanoporos de uma dimensão. Porém, para isto ser viável, os NTCs devem ser funcionalizados, uma vez que eles são apolares e não reagem diretamente com a água. Neste trabalho, se estudou o comportamento das moléculas de água interagindo com NTCs puros e funcionalizados. Foi realizada simulação de dinâmica molecular, com o programa GROMACS. Observou-se que, ao contrário dos outros tubos, somente no tubo (8,0) as moléculas de água não se encontraram em seu interior, devido ao seu pequeno diâmetro. Através da simulação computacional de primeiro princípios, via o programa SIESTA, foram realizados cálculos para NTCs de parede simples do tipo (8,0) carboxilados, posicionando as carboxilas em diferentes posições no anel aromático. Estes cálculos permitiram a retirada de parâmetros sobre a estrutura eletrônica dos sistemas e o conhecimento da estrutura mais estável. A partir destes resultados, estão sendo realizados cálculos empíricos, no programa GROMACS, com NTCs carboxilados, novamente dentro de uma caixa totalmente preenchida com moléculas de água.