

Patrícia Cordeiro Pereira Pampanelli

Modelagem de Nanotubos para Simulação

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

Juiz de Fora

Monografia submetida ao corpo docente do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Juiz de Fora como parte integrante dos requisitos necessários para obtenção do grau de bacharel em Ciência da Computação.

Aprovado em 01 de Dezembro de 2008.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Marcelo Bernardes Vieira, D. Sc.
Orientador

Prof. Sócrates de Oliveira Dantas, D. em
Física
Co-orientador

Prof. Marcelo Lobosco, D. Sc.

Sumário

Lista de Figuras

Resumo

1	Introdução	p. 10
1.1	Objetivos	p. 11
1.2	Visão Geral	p. 11
2	Geometria de nanotubos	p. 13
2.1	Célula unitária e zona de Brillouin	p. 13
2.2	Índices de Hamada	p. 15
2.2.1	Vetor Chiral	p. 15
2.2.2	Raio do nanotubo	p. 16
2.2.3	Ângulo Chiral	p. 17
2.2.4	Vetor de Translação	p. 18
3	Complexos Simpliciais e Operações Estelares	p. 20
3.1	Conceitos topológicos	p. 20
3.1.1	Complexos Simpliciais	p. 21
3.1.1.1	Relações entre Simplexos	p. 22
3.1.2	Característica de Euler	p. 23
3.2	Teoria Estelar	p. 24
3.2.1	Operações Estelares	p. 24

3.2.1.1	Edge Collapse e Half-edge Collapse	p. 25
3.2.1.2	Edge Flip	p. 26
3.2.1.3	Edge Weld	p. 28
3.2.1.4	Edge Split	p. 29
3.2.1.5	Considerações Finais	p. 29
4	Algoritmo de Bresenham aplicado à Geração de Nanotubos	p. 31
4.1	Algoritmo de Bresenham	p. 31
4.2	Considerações iniciais	p. 32
4.3	Demonstração para os Nanotubos	p. 32
4.3.1	Primeiro Hexágono - H_1	p. 36
4.3.2	Segundo Hexágono - H_2	p. 37
4.4	Conclusões	p. 37
4.5	Algoritmo de Traçado em Malhas Hexagonais	p. 39
5	Aplicação	p. 41
5.1	Nanotubo - Geração e Visualização	p. 41
5.1.1	Cálculo dos Vértices	p. 41
5.1.2	Tratamento de vértices redundantes	p. 42
5.2	Resultados	p. 44
5.2.1	Nanoestruturas	p. 45
5.3	Visualização com energia	p. 47
6	Conclusão	p. 48
6.1	Trabalhos Futuros	p. 48
	Referências	p. 50

Lista de Figuras

- 1 (a)Representa a rede hexagonal da folha de grafeno. A célula unitária é definida pelos vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . (b)Rede recíproca definida pelos vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 . A primeira zona de Brillouin encontra-se destacada em cinza escuro e a segunda zona de Brillouin contornada pela linha pontilhada. Os pontos Γ , M e K correspondem ao centro da zona de Brillouin, centro da aresta e o meio da aresta, respectivamente. p. 14
- 2 Representação de um hexágono, semelhantes aos da rede hexagonal, com a representação dos vetores unitários \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e a constante da rede hexagonal a_0 p. 14
- 3 Rede hexagonal com a representação de cada um dos três tipos de nanotubos e a definição correspondente dos índices de Hamada. p. 15
- 4 Rede hexagonal com a representação do vetor chiral \vec{C}_h e a agulação deste com a direção do vetor \vec{a}_1 . O vetor de translação no plano, mostrado por \vec{T} . No topo da imagem apresentam-se ainda os vetores unitários \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e os eixos cartesianos x e y . A área pontilhada corresponde à parte da folha de grafeno que é enrolada para formar o nanotubo de carbono. p. 16
- 5 Representação do raio em um nanotubo visto no espaço 3D. p. 17
- 6 Representação do vetor de translação \vec{T} em um nanotubo visto no espaço 3D. p. 19
- 7 (a) Visão espacial da malha de uma esfera. (b) Nanotubo de carbono representado por sua malha no espaço 3D. p. 20
- 8 Representação através de malha de um ambiente virtual. p. 21
- 9 Fecho convexo de um conjunto de 12 pontos no plano. p. 21

10	Representação de simplexes em algumas dimensões: (a) 0-simplexo é representado por um ponto; (a,b) 1-simplexo é representado por um segmento de reta; (a,b,c) 2-simplexo é representado por um triângulo; e (a,b,c,d) 3-simplexo é representado pelo tetraedro.	p. 22
11	Bordos de simplexes de dimensão 1 e 2. São representados pelos vértices v_0 e v_1 , no caso do simplexo de dimensão 1 e pelos vértices v_0 , v_1 e v_2 e as respectivas arestas, no caso do simplexo de dimensão 2.	p. 22
12	Os elementos em cinza representam a estrela do vértice v_0 , composta pelas arestas, pelas faces e por v_0 . Os elementos pontilhados representam o elo de um simplexo.	p. 23
13	Tabela com a característica de Euler para alguns poliedros convexos. Observa-se que todos são homeomorfos à esfera.	p. 24
14	(a) Ilustração de uma malha vista no plano onde a remoção da aresta $e = (u, v)$ destacada atende a condição de remoção. (b) A mesma malha da Figura(a) após a remoção da aresta $e = (u, v)$	p. 25
15	(a) Situação onde não é atendida a condição de remoção da aresta destacada em negrito. (b) Neste caso, a remoção é permitida sem a alteração da topologia da malha.	p. 25
16	(a) Representação da orientação de uma malha no sentido horário. (b) Malha após a aplicação da operação <i>edge collapse</i> com a orientação mantida no sentido horário.	p. 26
17	(a) Malha antes da aplicação da operação, sendo d_a a distância entre os vértices u e v . (b) Malha após a aplicação da operação <i>half-edge collapse</i> , onde a distância d_p entre os vértices u e v é diferente de d_a	p. 26
18	Visão 3D de uma malha antes(a) e depois(b) de aplicada a operação de <i>edge collapse</i>	p. 27
19	(a) Ilustração de uma malha vista no plano onde a aresta $e = (u, v)$ será substituída pela aresta (s, t) . (b) A mesma malha da Figura(a) após a troca.	p. 27
20	(a) Representação da orientação de uma malha no sentido horário. (b) Malha após a aplicação da operação <i>edge flip</i> com a orientação mantida no sentido horário.	p. 27

21	(a) Ilustração de uma malha vista no plano onde o vértice v é removido. (b) A mesma malha da Figura(a) após a remoção.	p. 28
22	(a) Representação da orientação de uma malha no sentido horário. (b) Malha após a aplicação da operação <i>edge weld</i> com a orientação mantida no sentido horário.	p. 28
23	(a) Ilustração de uma malha vista no plano onde o vértice v é adicionado. (b) A mesma malha da Figura(a) após a adição.	p. 29
24	Passos da decomposição da operação <i>edge collapse</i> em duas operações <i>edge flip</i> , nas arestas (u, s) e (u, t) , e a operação <i>edge weld</i> removendo o vértice u . O resultado é o mesmo obtido através da operações <i>edge collapse</i> na aresta (u, v)	p. 29
25	Sequência de operações aplicadas sobre uma malha para simplificação de um vértice.	p. 30
26	Malha quadriculada com a aproximação da reta gerada pelo algoritmo de Bresenham.	p. 31
27	Esquema de quais hexágonos são passíveis de serem escolhidos.	p. 32
28	A malha considerada para a demonstração encontra-se no plano xy . A reta aproximada é representada pelo vetor chiral \vec{C}_h (Sec. 2.2.1). O ponto $P_0(x_0, y_0)$ representa o centróide do hexágono e o ponto inicial do algoritmo.	p. 33
29	Definição dos pontos P_1 e P_2 e suas distâncias em relação à reta representada pelo vetor chiral \vec{C}_h . Enumeração dos hexágonos H_0 , hexágono inicial, H_1 e H_2 e seus respectivos centróides.	p. 34
30	Exemplo de situação onde o hexágono H_1 é escolhido. A distância d_1 entre o centróide de H_1 e a reta é menor que d_2	p. 36
31	Exemplo de situação onde o hexágono H_2 é escolhido. A distância d_2 entre o centróide de H_2 e a reta é menor que d_1	p. 37
32	Algumas propriedades trigonométricas podem ser observadas para o cálculo de pontos relevantes do hexágono, como o centróide ou os vértices.	p. 38

33	Esquema da numeração da malha hexagonal que auxilia na visualização da relação existente entre o algoritmo descrito neste capítulo e os índices de Hamada. Ressaltando as restrições impostas por (n,m) para a geração dos hexágonos, à exemplo do hexágono H_2 , onde $(0,1)$ violaria esta condição.	p. 39
34	Diagrama representativo para o algoritmo de traçado de retas em malhas hexagonais com seus principais elementos.	p. 40
35	Anel gerado pelo algoritmo de traçado de retas para um nanotubo com índices de Hamada $(10,3)$	p. 42
36	Anel gerado para um nanotubo do tipo <i>armchair</i> com índices de Hamada $(10,10)$	p. 42
37	Anel gerado para um nanotubo do tipo <i>zigzag</i> com índices de Hamada $(10,0)$	p. 43
38	Anel gerado para um nanotubo do tipo <i>chiral</i> com índices de Hamada $(10,2)$	p. 43
39	Anel gerado para um nanotubo do tipo <i>chiral</i> com índices de Hamada $(10,8)$	p. 44
40	Destaque de alguns vértices compartilhados entre um ou mais hexágonos.	p. 44
41	Nanotubo do tipo <i>chiral</i> de índices $(10,7)$. Sem o tratamento dos vértices redundantes este nanotubo apresenta 10200 vértices, já com o tratamento tem-se 3434 vértices.	p. 45
42	(a) Nanotubo <i>armchair</i> gerado a partir do índices $(20,20)$. (b) Nanotubo <i>chiral</i> gerado a partir do índices $(20,11)$. (c) Nanotubo <i>zigzag</i> gerado a partir do índices $(20,0)$	p. 45
43	Toro construído a partir de um nanotubo <i>armchair</i> com índices $(10,10)$.	p. 46
44	Hélice construída a partir de um nanotubo <i>armchair</i> com índices $(10,10)$.	p. 46
45	(a) Hélice com a distribuição de energia evidenciando a parte que sofreu maior distorção. (b) Toro com a distribuição de energia onde é possível observar que a região central sofreu maior distorção.	p. 47
46	Exemplo de junção com 10 conexões para nanotubos <i>armchair</i> e 10 para nanotubos <i>zigzag</i> (ZSOLDOS et al., 2004).	p. 49

Resumo

Este trabalho apresenta as etapas estudadas no processo de modelagem de nanotubos de carbono.

A primeira etapa consiste na modelagem matemática, fundamental para as etapas seguintes. A seguir apresentou-se o desenvolvimento do modelo computacional, pensado em função da modelagem matemática. Esta etapa apresenta o método que será utilizado para a construção e manipulação do nanotubo, destacando suas vantagens e desvantagens.

Por fim, para o melhor entendimento do processo de modelagem, optou-se por fazer uma implementação que abordasse diversos aspectos observados na teoria.

1 *Introdução*

O estudo de nanomateriais apresenta hoje um vasto campo para pesquisa e desenvolvimento de novas tecnologias, sendo estas em diversas áreas, como engenharia, física, química, medicina e ciência da computação. O foco nesta área se deve à existência de obstáculos para que esses materiais sejam empregados em produtos de escala comercial. Como exemplo disso, pode-se citar o alto custo para a análise e síntese de alguns desses materiais.

Um tipo especial de estruturas nanométricas, os nanotubos de carbono, são fundamentais para diversas aplicações, desde tecidos super resistentes até componentes eletrônicos de alta eficiência. Os nanotubos de carbono, citados pela primeira vez em (IJIMA, 1991), despertam grande interesse nos cientistas devido à dependência das suas propriedades com a sua geometria. Os nanotubos são apresentados em diversas formas estruturais que dão origem à notáveis propriedades eletrônicas e mecânicas.

Devido ao alto custo de manipulação e produção dos nanotubos de carbono, as pesquisas na área de computação tornam-se essenciais, possibilitando a modelagem destas estruturas. A modelagem computacional permite o estudo das características físicas dos nanotubos de carbono. As pesquisas nessa área permitem ainda realizar diversas simulações sobre os modelos desenvolvidos. Um exemplo de simulação interessante é esticar o nanotubo de carbono e detectar o ponto onde ocorre a sua ruptura e qual o impacto deste evento em suas propriedades.

A computação gráfica, inserida neste contexto de modelagem computacional, permite uma abordagem geométrica dos nanotubos e viabiliza a visualização de resultados que podem ser analisados por cientistas de outras áreas. O uso de computação gráfica torna as simulações mais intuitivas, além de evidenciar falhas de modelagem ou simulação.

1.1 Objetivos

O objetivo primário desse trabalho é estudar os diversos problemas e métodos para a modelagem. Alguns aspectos também serão abordados, como a capacidade de representar estruturas complexas com objetivo de aproximar os modelos das situações encontradas em observações reais. Para a realização dessa modelagem, serão utilizados não somente os aspectos geométricos, mas também informações físicas sobre estas estruturas.

Um objetivo secundário desta monografia é o desenvolvimento de uma modelagem que seja eficiente. A medida de desempenho é fundamental para que simulações mais complexas possam ser realizadas. Um outro subproduto deste trabalho é tornar viável a modelagem de estruturas mais complexas através da junção de duas ou mais estruturas (ZSOLDOS et al., 2004).

1.2 Visão Geral

Este trabalho apresenta as etapas necessárias para a modelagem de nanotubos de carbono.

No Capítulo 2 é apresentada a modelagem matemática do problema, ou seja, o embasamento matemático utilizado para formular o método de construção dos nanotubos de carbono. O foco principal deste método é o *vetor chiral* descrito na Seção 2.2.1 que é utilizado para aproximação dos hexágonos e os *índices de Hamada* (Sec. 2.2) usados para a enumeração da malha hexagonal.

No Capítulo 3 são descritos os conceitos de manipulação de malhas utilizados para a representação do nanotubo de carbono. Na Seção 3.2.1 são apresentadas as operações esteares que são fundamentais para a manipulação coerente das estruturas modeladas. Estes conceitos são importantes para realizar mudanças na geometria dos objetos sem alterar suas propriedades topológicas.

O principal aspecto deste trabalho é tratado no Capítulo 4, onde o método para traçado de retas em malhas hexagonais é descrito. A demonstração feita a partir do algoritmo de Bresenham é apresentada na Seção 4.3. O foco computacional do problema é descrito na Seção 4.5, onde é apresentado um fluxograma simplificado do algoritmo.

A aplicação desenvolvida para este trabalho é descrita no Capítulo 5. Na Seção 5.1 são descritos alguns aspectos computacionais necessários no nível da aplicação. Os resultados

obtidos com os estudos teóricos e com trabalho prático são mostrados na Seção 5.2.

O Capítulo 6 apresenta a conclusão deste trabalho e a Seção 6.1 descreve as perspectivas para os trabalhos futuros.

2 Geometria de nanotubos

Neste capítulo serão abordados os aspectos matemáticos da geometria dos nanotubos. Essas definições servirão de base para elaboração do modelo computacional. Vale ressaltar que os dados teóricos e práticos são muito próximos quando se referem aos nanotubos de parede simples ou, no caso de nanotubos de parede múltipla, à camada mais externa. A proximidade entre as camadas intermediárias dos nanotubos de parede múltipla afetam o cálculo teórico do diâmetro, sendo necessárias ferramentas matemáticas mais precisas para estes casos. (KHARISSOVA; RANGEL-CARDENAS; CASTA, 2007)

2.1 Célula unitária e zona de Brillouin

A célula unitária é definida pelos vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 que representam os vetores unitários da rede hexagonal (Fig. 1a). Esses são destacados no hexágono da Figura 2.

O módulo desses vetores é definido como $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a = 2.46\text{Å}$. O parâmetro a representa a constante da rede hexagonal, onde $a = \sqrt{3}a_0 = 2.46\text{Å}$. A constante a_0 , representando o lado do hexágono na Figura 2, corresponde à distância entre dois átomos de carbono no grafite, com valor de 1.42Å .

A zona de Brillouin, citada pela primeira vez em (BOUCKAERT; SMOLUCHOWSKI; WIGNER, 1936), é alvo de grande interesse de estudiosos devido à suas propriedades simétricas. Esses pontos são relevantes para o estudo de propriedades físicas e químicas de estruturas cristalinas. Para o caso da estrutura hexagonal, pode-se definir alguns pontos de simetria, além da primeira zona de Brillouin, destacada pelo hexágono em cinza escuro na Figura 1b.

A primeira zona de Brillouin para a rede hexagonal é representada como a rede recíproca à célula unitária e é definida através dos vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 (Fig. 1b):

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right) \quad \vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right) \quad (2.1)$$

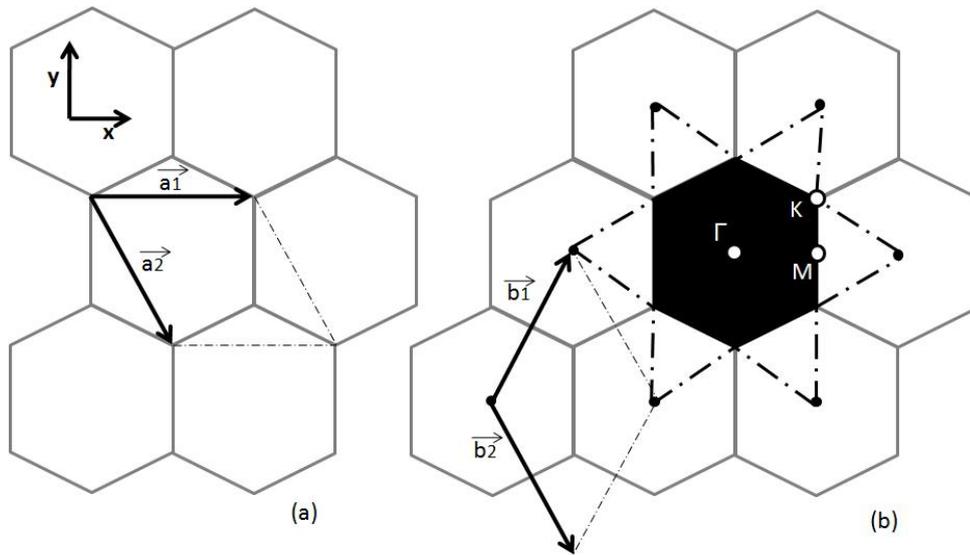


Figura 1: (a) Representa a rede hexagonal da folha de grafeno. A célula unitária é definida pelos vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . (b) Rede recíproca definida pelos vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 . A primeira zona de Brillouin encontra-se destacada em cinza escuro e a segunda zona de Brillouin contornada pela linha pontilhada. Os pontos Γ , M e K correspondem ao centro da zona de Brillouin, centro da aresta e o meio da aresta, respectivamente.

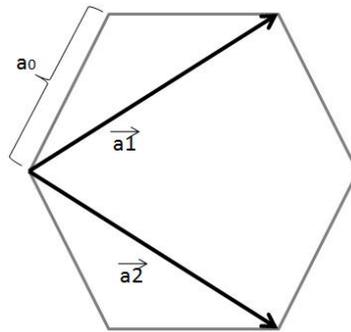


Figura 2: Representação de um hexágono, semelhantes aos da rede hexagonal, com a representação dos vetores unitários \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e a constante da rede hexagonal a_0

onde o valor da constante de rede é $4\pi/\sqrt{3}a$.

Observa-se na Figura 1b os três pontos de simetria da zona de Brillouin:

- $\Gamma = (0, 0)$: centro da zona de Brillouin;
- M : centro de uma aresta;

- K: meio de uma aresta conectando dois hexágonos;

Definidos os pontos de simetria, tem-se que a segunda zona de Brillouin está definida pela área pontilhada na Figura 1b.

2.2 Índices de Hamada

Os *índices de Hamada* permitem que diversas informações geométricas dos nanotubos de carbono sejam inferidas (PERALTA-INGA. et al., 2003; HINOJOSA, 2007). Esses índices serão definidos a partir de $n, m \in Z$, onde $n \geq m$.

Para diferentes valores de n e m , pode-se classificar os nanotubos como: *zigzag*, para os pares $(n, 0)$; *armchair*, para os pares (n, n) ; *chiral*, para os demais pares (n, m) , tal que $n > m > 0$. Pode-se observar na Figura 3 que esta definição dos índices de Hamada impacta na diferença entre os três tipos de nanotubos.

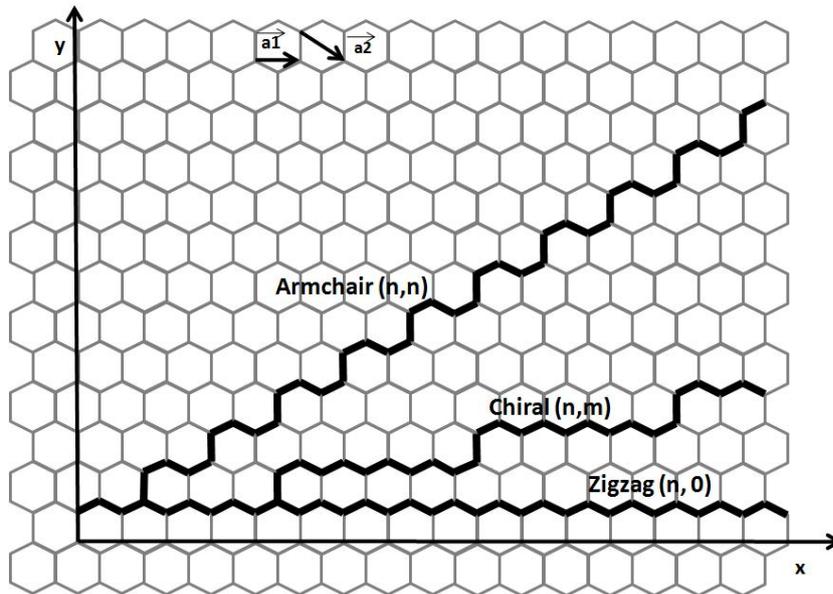


Figura 3: Rede hexagonal com a representação de cada um dos três tipos de nanotubos e a definição correspondente dos índices de Hamada.

2.2.1 Vetor Chiral

O nanotubo pode ser visto como uma folha de grafite, ou grafeno, enrolada na direção determinada pelo *vetor chiral*, representado pelo vetor \vec{C}_h na Figura 4. Este vetor é

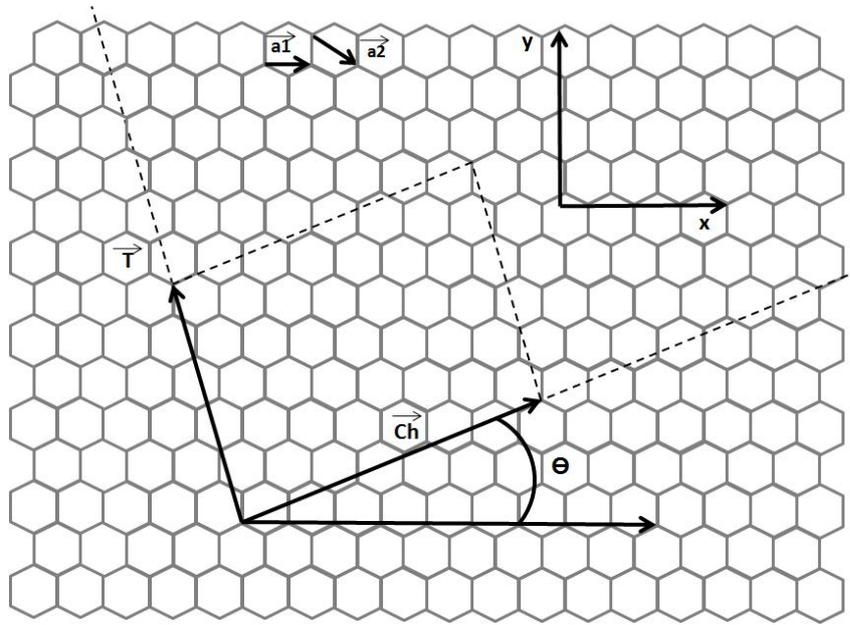


Figura 4: Rede hexagonal com a representação do vetor chiral \vec{C}_h e a agulãção deste com a direãõ do vetor \vec{a}_1 . O vetor de translaãõ no plano, mostrado por \vec{T} . No topo da imagem apresentam-se ainda os vetores unitários \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e os eixos cartesianos x e y . A área pontilhada corresponde à parte da folha de grafeno que é enrolada para formar o nanotubo de carbono.

definido da seguinte forma:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \equiv (n, m) \quad (2.2)$$

onde \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores unitários da rede hexagonal definidos na Seãõ 2.1.

Definido o vetor chiral, pode-se determinar o diâmetro do nanotubo através do módulo de \vec{C}_h , como visto na Figura 4:

$$|\vec{C}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (2.3)$$

2.2.2 Raio do nanotubo

A *raio do nanotubo* é deduzido a partir da equaãõ do perímetro e apresentado na Figura 5:

$$R = \frac{|\vec{C}_h|}{2\pi} \quad (2.4)$$

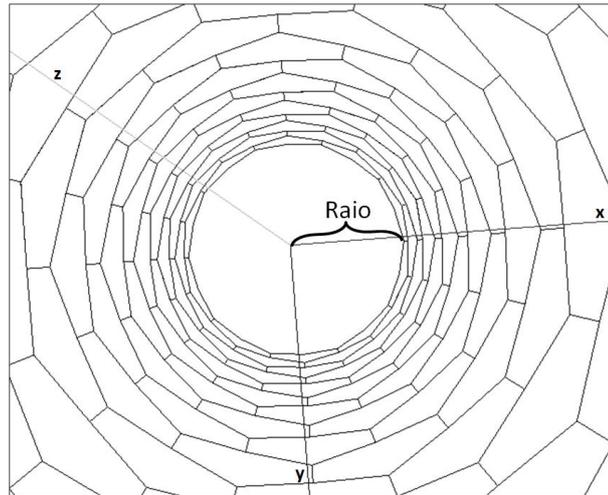


Figura 5: Representação do raio em um nanotubo visto no espaço 3D.

Substituindo a Equação 2.3 na equação do perímetro apresentada acima, tem-se que:

$$R = \frac{|\vec{C}_h|}{2\Pi} = \frac{a}{2\Pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (2.5)$$

A equação do raio é apresentada de acordo com a definição dos índices de Hamada. Para cada um dos tipos de nanotubos, tem-se que:

- *Chiral*: ($n > m > 0$)

$$R = \frac{a}{2\Pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (2.6)$$

- *Armchair*: ($n = m$)

$$R = \frac{a}{2\Pi} n\sqrt{3} \quad (2.7)$$

- *Zigzag*: ($m = 0$)

$$R = \frac{a}{2\Pi} n \quad (2.8)$$

2.2.3 Ângulo Chiral

A medida do *ângulo chiral* é obtida a partir do ângulo formado pelos vetores: chiral \vec{C}_h e vetor unitário \vec{a}_1 , como visto na Figura 4. Com essa premissa tem-se o produto escalar:

$$\cos \Theta = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1}{|\vec{C}_h| |\vec{a}_1|} \quad (2.9)$$

Com a Figura 2, são deduzidas as seguintes relações para os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 :

$$\vec{a}_1 = a \cos 30\hat{i} + a \sin 30\hat{j} \quad (2.10)$$

$$\vec{a}_2 = a \cos 30\hat{i} - a \sin 30\hat{j} \quad (2.11)$$

Com as relações 2.10 e 2.11 e com a Equação 2.2, o ângulo chiral é obtido somente em função dos índices de Hamada, fundamental para manter o modelo simples e representativo:

$$\cos \Theta = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad (2.12)$$

De forma análoga à que foi feita para o cálculo do raio, conclui-se que o ângulo chiral é definido da seguinte forma, para os diferentes tipos de nanotubos:

- *Chiral*: ($n > m > 0$)

$$\cos \Theta = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}; 0^\circ < \Theta < 30^\circ \quad (2.13)$$

- *Armchair*: ($n = m$)

$$\cos \Theta = \frac{\sqrt{3}}{2}; \Theta = 30^\circ \quad (2.14)$$

- *Zigzag*: ($m = 0$)

$$\cos \Theta = 1; \Theta = 0^\circ \quad (2.15)$$

2.2.4 Vetor de Translação

O *vetor de translação* \vec{T} , observado na Figura 4 e visto no espaço 3D na Figura 6, representa o eixo do nanotubo de carbono e, formando um ângulo de 90° com o vetor \vec{C}_h , delimita a área da folha de grafeno que será enrolada para formar o nanotubo (LEITE, 2005). Esse pode ser expressado em função dos vetores unitários da rede hexagonal:

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \equiv (t_1, t_2) \quad (2.16)$$

Partindo da premissa de que $\vec{C}_h \perp \vec{T}$, pode-se determinar as constantes t_1 e t_2 em função dos índices de Hamada:

$$t_1 = (2m + n)/d_r \quad (2.17)$$

$$t_2 = -(2n + m)/d_r \quad (2.18)$$

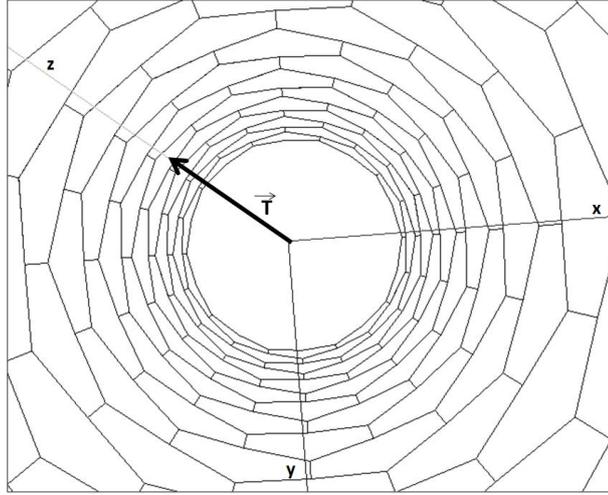


Figura 6: Representação do vetor de translação \vec{T} em um nanotubo visto no espaço 3D.

onde d_r é o máximo divisor comum entre $(2m + n)$ e $(2n + m)$.

O *número de hexágonos* pertencentes à célula unitária N' é definido dividindo sua área pela área do hexágono, e dado em função de (n, m) :

$$N' = \frac{|\vec{C}_h \times \vec{T}|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} \quad (2.19)$$

Substituindo os vetores da equação pelas demonstrações apresentadas anteriormente, tem-se o número de hexágonos N' dado por:

$$N' = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_r} \quad (2.20)$$

Desta forma, o *número de átomos de carbono* N na célula unitária é dado por $2N'$, já que cada hexágono contém dois átomos.

3 *Complexos Simpliciais e Operações Estelares*

A representação através de malhas é comumente utilizada em diversas áreas como a reconstrução de superfícies, a simplificação de modelos e animação. A modelagem e manipulação destas malhas são baseadas em diversos conceitos matemáticos apresentados neste capítulo.

Os nanotubos de carbono, neste nível de abstração, são considerados malhas hexagonais nas quais são permitidas operações para diversos fins. Essas têm como objetivo a modelagem de estruturas mais complexas ou a modificação de sua estrutura no decorrer de alguma simulação. Diante disso, as estruturas apresentadas nas Figuras 7 e 8 têm o mesmo significado no contexto da manipulação de malhas.

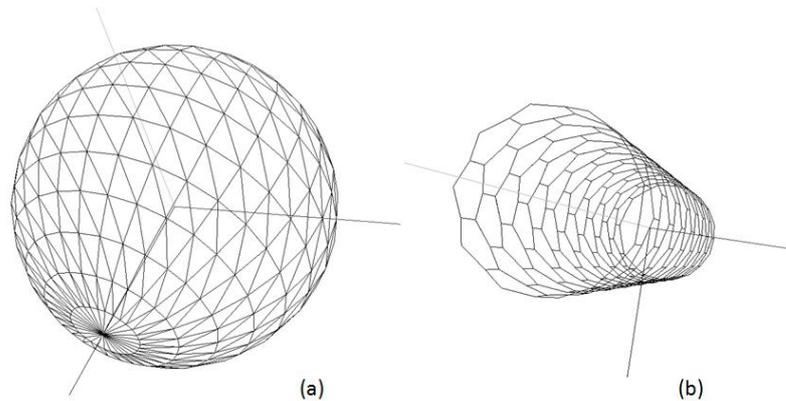


Figura 7: (a) Visão espacial da malha de uma esfera. (b) Nanotubo de carbono representado por sua malha no espaço 3D.

3.1 **Conceitos topológicos**

A análise topológica é fundamental para manter a coerência do modelo, ou seja, garantir que a topologia não seja alterada de forma indesejada. Este estudo é a base para

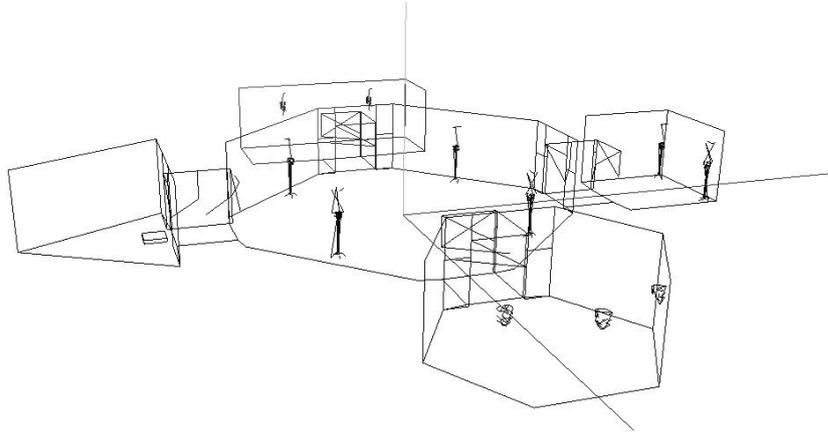


Figura 8: Representação através de malha de um ambiente virtual.

a definição dos operadores aplicados no modelo.

3.1.1 Complexos Simpliciais

O *fecho convexo* de um conjunto de pontos X de dimensão n é definido como a interseção de todos os conjuntos convexos que o contém.

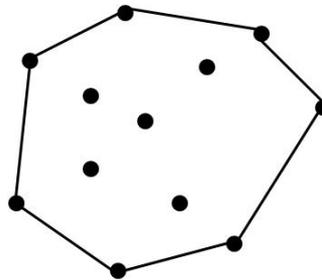


Figura 9: Fecho convexo de um conjunto de 12 pontos no plano.

Em um caso particular onde os pontos se encontram alinhados no plano, o fecho convexo irá corresponder ao polígono convexo onde seus vértices pertencem ao conjunto inicial (Fig. 9).

Um simplexo de dimensão n é o fecho de $n+1$ pontos v_0, \dots, v_k onde $v_i \in R^m$, ou seja, os vetores formados por $v_j - v_0$, com $j = 1 \dots k$ são linearmente independentes.

Em geometria, simplexo ou um n -simplexo é a generalização da noção de triângulo para o espaço R^n (Fig. 10).

Um *complexo simplicial* Σ é um conjunto finito de simplexos tais que:

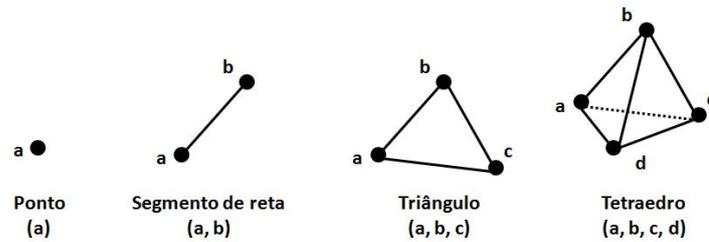


Figura 10: Representação de simplexos em algumas dimensões: (a) 0-simplexo é representado por um ponto; (a,b) 1-simplexo é representado por um segmento de reta; (a,b,c) 2-simplexo é representado por um triângulo; e (a,b,c,d) 3-simplexo é representado pelo tetraedro.

1. Se $\sigma \in \Sigma$, então todas as faces de σ pertencem a Σ .

1. Se $\sigma, \gamma \in \Sigma$, então $\sigma \cap \gamma$ é uma face própria de σ e γ .

A dimensão de um complexo simplicial Σ é definida como um inteiro $d = \max\{\dim(\sigma) \mid \sigma \in \Sigma\}$ e Σ é definido como um *complexo simplicial d-dimensional* ou *d-complexo simplicial*.

O *bordo* de um simplexo σ , denotado por $\delta\sigma$, é a coleção de todas as faces próprias de σ (Fig. 11). O *interior* de um simplexo é representado por $\text{Int}(\sigma) = \sigma - \delta\sigma$.

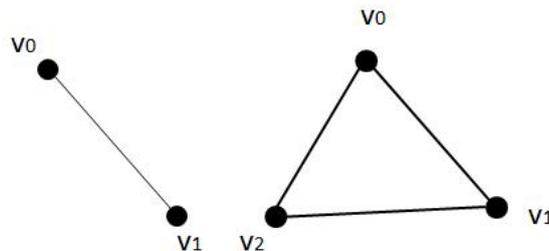


Figura 11: Bordos de simplexos de dimensão 1 e 2. São representados pelos vértices v_0 e v_1 , no caso do simplexos de dimensão 1 e pelos vértices v_0 , v_1 e v_2 e as respectivas arestas, no caso do simplexo de dimensão 2.

3.1.1.1 Relações entre Simplexos

A *estrela* de um simplexo σ é denotado por $\text{star}(\sigma)$. Esta representa a união de todos os simplexos γ que são co-face de σ (FERREIRA, 2006).

O *elo* de um simplexo σ , denotado por $link(\sigma)$, é o conjunto de simplexos $\gamma \in Z$ tais que:

1. γ é face de algum simplexo de $star(\sigma)$.
2. $\gamma \notin star(\sigma)$.

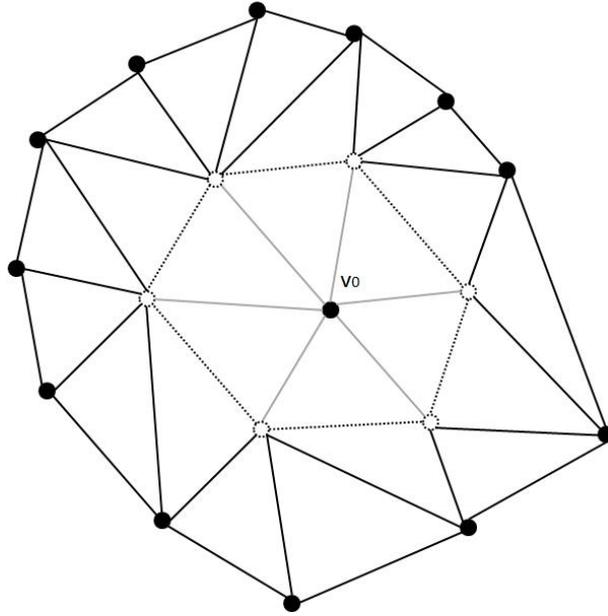


Figura 12: Os elementos em cinza representam a estrela do vértice v_0 , composta pelas arestas, pelas faces e por v_0 . Os elementos pontilhados representam o elo de um simplexo.

3.1.2 Característica de Euler

A *característica de Euler* é um invariante topológico, ou seja, uma propriedade do espaço topológico que, se mantida, garante que dois objetos são homeomorfos.

A fórmula de Euler para poliedros convexos é dada por:

$$V + F = A + 2 \quad (3.1)$$

onde V representa o número de vértices, F o número de faces e A o número de arestas.

Esta fórmula é generalizada para k dimensões e para poliedros que não homeomorfos à esfera. A característica de Euler para um complexo simplicial M (Sec. 3.1.1) com n_k células de dimensão k :

$$X(M) = n_0 - n_1 + n_2 - n_3 + \dots \quad (3.2)$$

Desta forma, no espaço R^3 , as variáveis n_0 , n_1 e n_2 representam os vértices, arestas e faces, respectivamente.

A Tabela 3.2 apresenta o cálculo da característica de Euler para alguns poliedros convexos. O valor encontrado para o invariante topológico é o mesmo para todos os poliedros, visto que todos são homeomorfos à esfera. Já no toro, devido à alteração da topologia, a característica de Euler apresenta um valor diferente do encontrado para os poliedros homeomorfos à esfera, ou seja, neste caso $V - A + F = 0$.

Poliedro	Vértices	Arestas	Faces	Característica de Euler: $V - A + F$
Tetraedro	4	6	4	2
Hexaedro	8	12	6	2
Octaedro	6	12	8	2
Icosaedro	12	30	20	2
Dodecaedro	20	30	12	2

Figura 13: Tabela com a característica de Euler para alguns poliedros convexos. Observa-se que todos são homeomorfos à esfera.

3.2 Teoria Estelar

A Teoria Estelar, desenvolvida por (ALEXANDER, 1930) e (NEWMAN, 1926), define uma forma de manipular superfícies combinatoriais sem modificar sua topologia. Mais recentemente, a teoria foi consolidada por (PACHNER, 1991). O foco desta formalização é demonstrar a equivalência entre complexos simpliciais (LICKORISH, 1999).

De acordo com a Teoria Estelar, duas variedades combinatoriais n -dimensionais são homeomórficas linearmente por partes se, e somente se, estão relacionadas por uma seqüência de operadores estelares.

3.2.1 Operações Estelares

Como foi descrito na Seção 3.1.1.1, o elo e a estrela de um simplexo σ definem sua vizinhança. Pode-se modificar essa vizinhança sem que haja alteração na topologia da malha, ou seja, respeitando as condições apresentadas na Seção 3.1.2. As *operações estelares* atendem a estas condições (VIEIRA et al., 2003).

3.2.1.1 Edge Collapse e Half-edge Collapse

A operação de *edge collapse* consiste na remoção de uma aresta $e = (u, v)$, como mostrado na Figura 14.

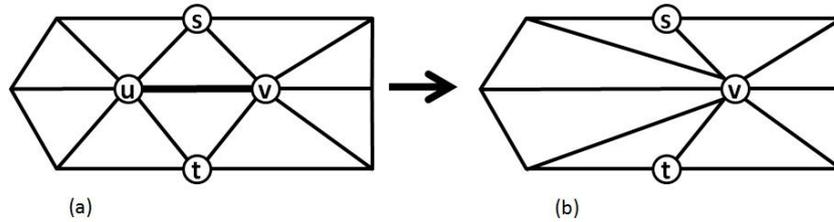


Figura 14: (a) Ilustração de uma malha vista no plano onde a remoção da aresta $e = (u, v)$ destacada atende a condição de remoção. (b) A mesma malha da Figura(a) após a remoção da aresta $e = (u, v)$.

Para não alterar a topologia da malha, a remoção da aresta destacada na Figura 14 é feita de acordo com as seguintes condições:

1. $link(u) \cap link(v) = link(e)$;
1. Se u e v são vértices da borda, e é também uma aresta da borda;
1. A malha tem mais de 4 vértices se nem u nem v são vértices de fronteira, ou a malha tem mais de 3 vértices se u e v são vértices de fronteira.

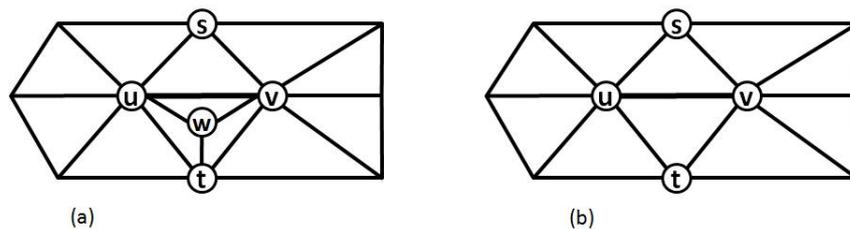


Figura 15: (a) Situação onde não é atendida a condição de remoção da aresta destacada em negrito. (b) Neste caso, a remoção é permitida sem a alteração da topologia da malha.

A Figura 15(a) apresenta uma das situações onde a remoção da aresta não é permitida, ou seja, a sua aplicação implicaria na alteração da topologia da malha. Já na Figura 15(b) não ocorreria a mudança na topologia, caso a operação fosse feita.

Essa observação é comprovada pelo cálculo da característica de Euler para a malhas antes e depois da remoção da aresta. A malha inicial(Fig. 14(a)) apresenta a característica

de Euler igual à 1, de acordo com a definição da Seção 3.1.2. Após a remoção (Fig. 14(b)), o valor encontrado para a característica de Euler é mantido. O que não ocorre com a Figura 15(a), se for removida a mesma aresta.

A orientação da malha é outro aspecto importante que deve ser observado. Pela Figura 16, fica evidente que, com a aplicação da operação de *edge collapse*, a orientação da malha é mantida.

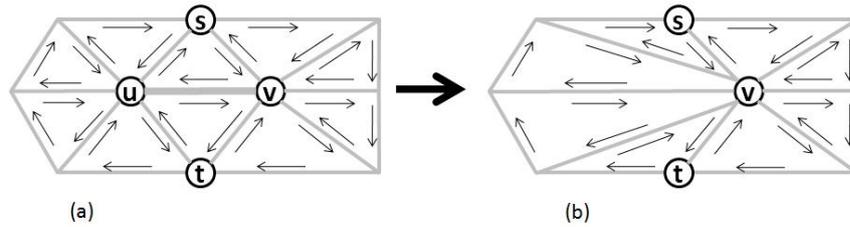


Figura 16: (a) Representação da orientação de uma malha no sentido horário. (b) Malha após a aplicação da operação *edge collapse* com a orientação mantida no sentido horário.

A operação *half-edge collapse* é uma variação da operação *edge collapse*. Nesta é feito o deslocamento do vértice em relação ao outro, como observado na Figura 17. Esse deslocamento pode ser determinado pela aplicação ou, como padrão, deslocar o vértice para o ponto médio da aresta $e = (u, v)$.

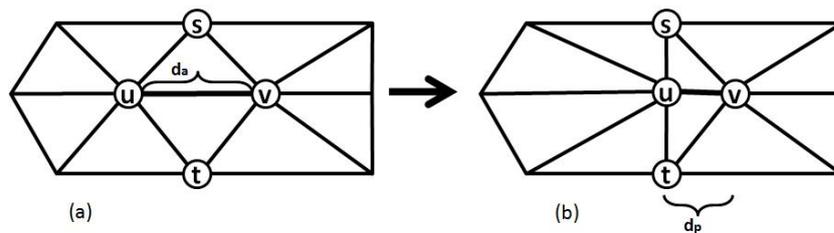


Figura 17: (a) Malha antes da aplicação da operação, sendo d_a a distância entre os vértices u e v . (b) Malha após a aplicação da operação *half-edge collapse*, onde a distância d_p entre os vértices u e v é diferente de d_a .

A aplicação da operação de *edge collapse* em uma malha 3D é observada na Figura 18.

3.2.1.2 Edge Flip

A operação de *edge flip* consiste na inversão de duas arestas compartilhadas por duas faces, como mostra a Figura 19.

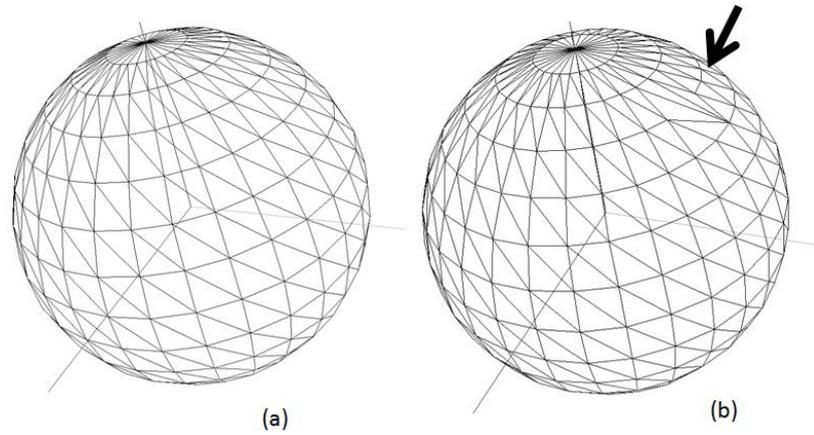


Figura 18: Visão 3D de uma malha antes(a) e depois(b) de aplicada a operação de *edge collapse*.

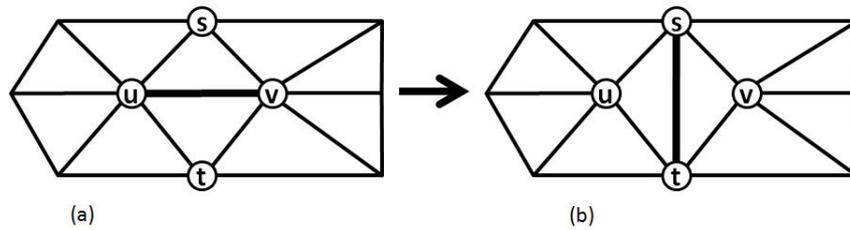


Figura 19: (a) Ilustração de uma malha vista no plano onde a aresta $e = (u, v)$ será substituída pela aresta (s, t) . (b) A mesma malha da Figura(a) após a troca.

Assim como a operação de *edge collapse*, uma condição é respeitada para que a operação de *edge flip* não modifique a topologia da malha. A condição diz que a troca de uma aresta do interior da malha $e = (u, v)$ pela aresta (s, t) não altera a topologia se (s, t) não existir na malha inicial (HOPPE et al., 1993).

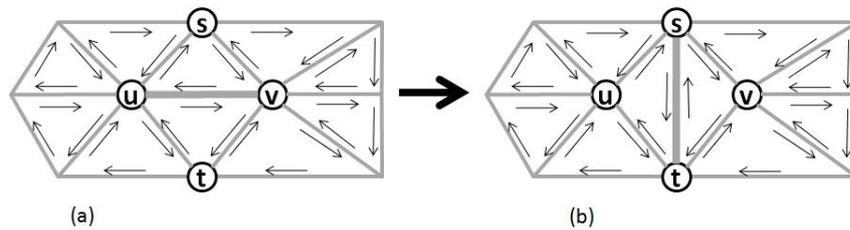


Figura 20: (a) Representação da orientação de uma malha no sentido horário. (b) Malha após a aplicação da operação *edge flip* com a orientação mantida no sentido horário.

A Figura 20 apresenta orientação da malha no sentido horário antes e depois da aplicação da operação *edge flip*. Observa-se que a orientação foi mantida.

3.2.1.3 Edge Weld

Considere um vértice central v , adjacente aos vértices s , u , t e w (Fig. 21). A *estrela* de v forma as 4 faces. A operação de *edge weld* remove o vértice v e ajusta as 4 faces para formar somente duas. A aresta mantida e pode ser (w, u) ou (s, t) . O resultado são duas faces compartilhando a aresta e .

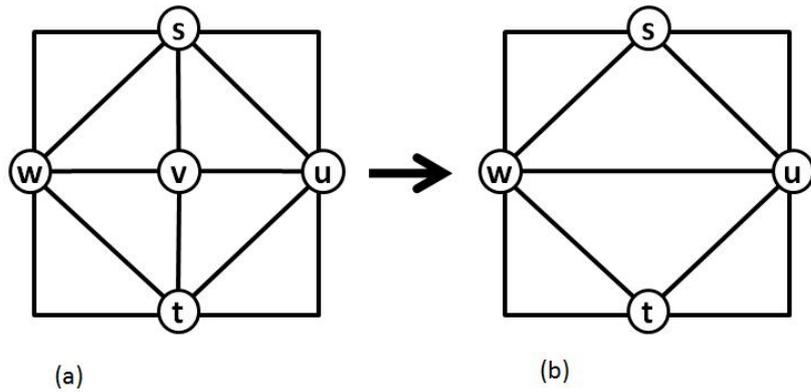


Figura 21: (a) Ilustração de uma malha vista no plano onde o vértice v é removido. (b) A mesma malha da Figura(a) após a remoção.

A operação de *edge weld* pode ser vista como uma operação de *edge collapse* entre os vértices v e u , como pode ser observado na Figura 21.

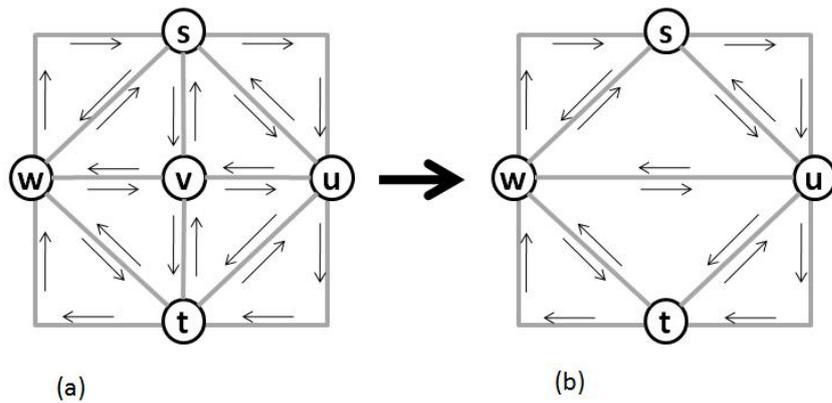


Figura 22: (a) Representação da orientação de uma malha no sentido horário. (b) Malha após a aplicação da operação *edge weld* com a orientação mantida no sentido horário.

Assim como as demais operações estelares, é visto na Figura 22 que a orientação da malha é mantida com a aplicação das operações de *edge weld*.

3.2.1.4 Edge Split

A operação de *edge split* é vista como o inverso da operação *edge weld*(Fig. 23). Das operações apresentadas aqui, esta é a única capaz de adicionar detalhe à malha. As demais operações são vistas como formas de simplificação do modelo(VELHO, 2001).

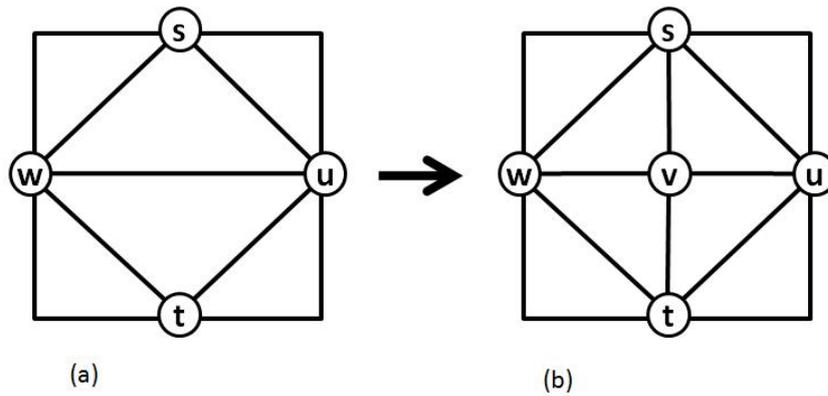


Figura 23: (a) Ilustração de uma malha vista no plano onde o vértice v é adicionado. (b) A mesma malha da Figura(a) após a adição.

3.2.1.5 Considerações Finais

A operação *edge collapse* pode ser decomposta em operações mais simples, apresentadas nas seções anteriores. Como visto na Figura 24, duas operações *edge flip* e uma operação *edge weld* apresentam mesmo resultado da operação *edge collapse*.

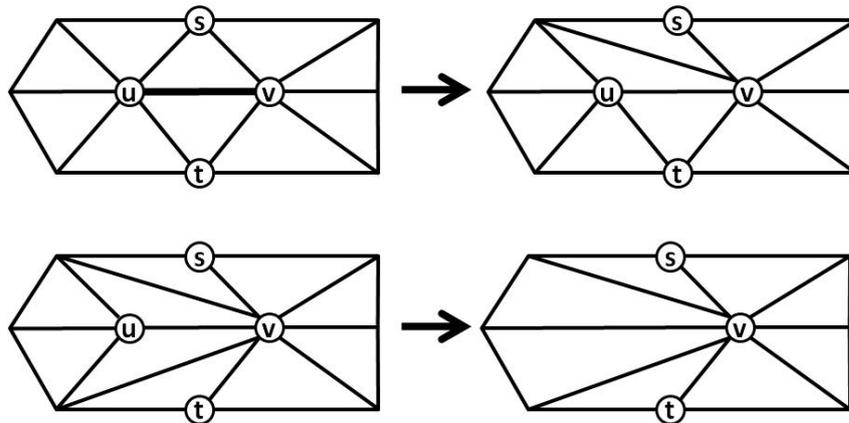


Figura 24: Passos da decomposição da operação *edge collapse* em duas operações *edge flip*, nas arestas (u, s) e (u, t) , e a operação *edge weld* removendo o vértice u . O resultado é o mesmo obtido através das operações *edge collapse* na aresta (u, v) .

Por fim, essas operações podem ser combinadas para que se obtenha um resultado desejado. A aplicação mais comum é a simplificação (Fig. 25). Contudo, no caso dos nanotubos, podem ser aplicadas para alterar algumas geometrias para, por exemplo, criar junções entre estruturas distintas.

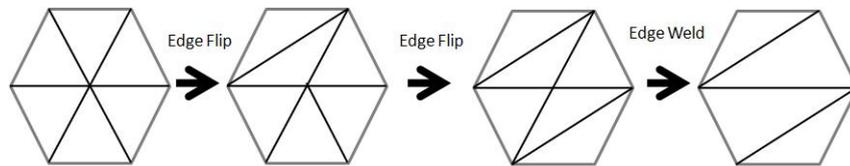


Figura 25: Sequência de operações aplicadas sobre uma malha para simplificação de um vértice.

4 *Algoritmo de Bresenham aplicado à Geração de Nanotubos*

4.1 Algoritmo de Bresenham

Este algoritmo foi desenvolvido por Jack E. Bresenham com o objetivo de desenhar linhas em dispositivos matriciais (BRESENHAM, 1962). São necessárias aproximações, já que esses dispositivos não permitem desenhar retas de forma contínua. Desta forma, o algoritmo permite desenhar no espaço discreto de uma malha quadriculada a reta que minimize o erro para a reta original (Fig. 26).

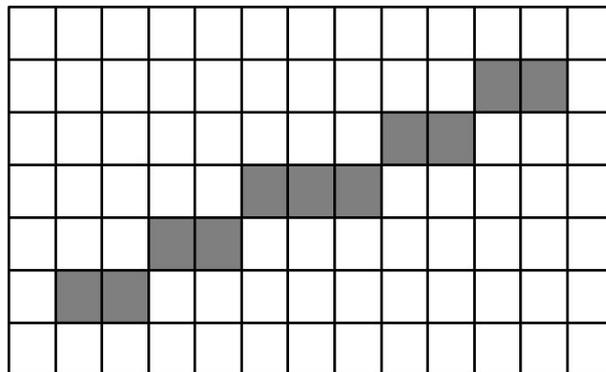


Figura 26: Malha quadriculada com a aproximação da reta gerada pelo algoritmo de Bresenham.

A principal característica do algoritmo é fazer uso de aritmética inteira. Esta é uma grande vantagem do algoritmo pois aritmética com ponto flutuante é muito mais custosa para o computador.

O algoritmo foi inicialmente demonstrado para o primeiro quadrante, sendo facilmente estendido para os demais quadrantes. Com pequenas expansões, o algoritmo de Bresenham pode ser usado ainda para desenhar outras formas geométricas, como círculos,

mantendo suas características de aritmética inteira.

4.2 Considerações iniciais

A geração dos nanotubos precisa de ser feita de forma rápida e evitando erros numéricos. Com estas premissas, conclui-se que o algoritmo de Bresenham é a melhor opção para solucionar este problema, por apresentar essas duas características de forma evidente. Outro fator importante nesta decisão, é a simplicidade com que o algoritmo de Bresenham é implementado.

O algoritmo é utilizado para a decisão de qual hexágono renderizar para obter a melhor aproximação para a reta representada pelo vetor chiral descrito na Seção 2.2.1, de forma semelhante ao algoritmo original. A escolha dos hexágonos é feita sempre entre duas possibilidades H_1 ou H_2 (Fig. 27), considerando-se H_0 como o hexágono inicial.

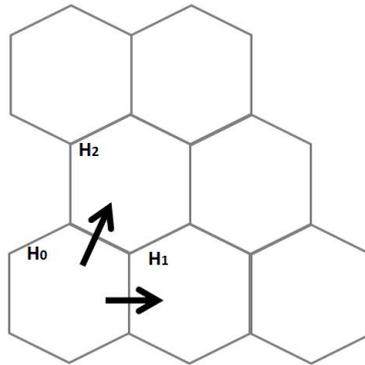


Figura 27: Esquema de quais hexágonos são passíveis de serem escolhidos.

Para utilizar o algoritmo na geração dos nanotubos, foram feitas modificações em seu mecanismo, como mostrado na seção seguinte.

4.3 Demonstração para os Nanotubos

A demonstração é feita devido à mudança no domínio do problema, já que a malha onde a reta é aproximada apresenta características distintas da malha quadriculada (Fig. 26). Neste caso, é considerada a malha hexagonal vista no plano, como observado na Figura 28. As transformações aplicadas para que a malha obtida tenha o formato cilíndrico são apresentadas no Capítulo 5.

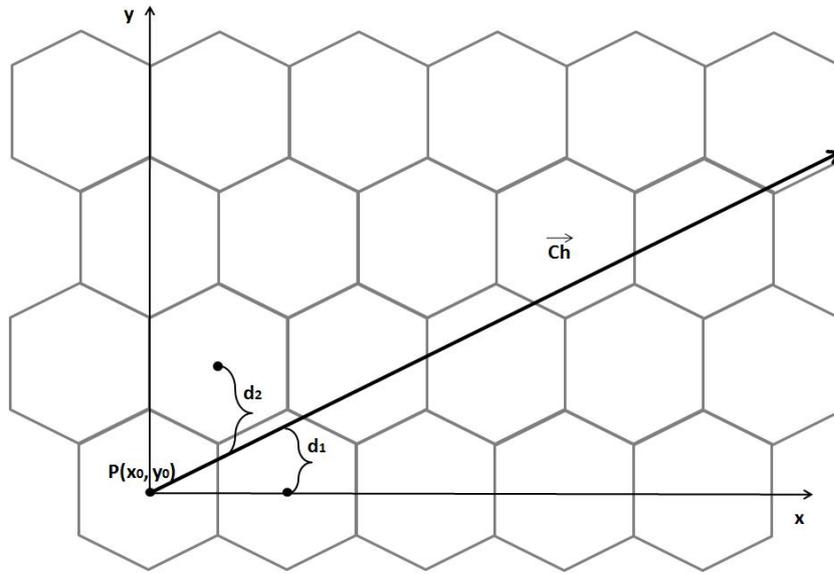


Figura 28: A malha considerada para a demonstração encontra-se no plano xy . A reta aproximada é representada pelo vetor chiral \vec{C}_h (Sec. 2.2.1). O ponto $P_0(x_0, y_0)$ representa o centróide do hexágono e o ponto inicial do algoritmo.

O ponto inicial do método é dado pelo centróide do primeiro hexágono posicionado na origem, como visto da Figura 28. E a decisão de qual hexágono escolher é baseada nas distâncias dos centróides dos hexágonos à reta dada pelo vetor chiral \vec{C}_h , representadas por d_1 e d_2 (Fig. 28). O hexágono de menor distância será escolhido. Toma-se de início a equação da reta:

$$y = mx + q \quad (4.1)$$

Para simplificação da demonstração, suponha que a reta passe pela origem, ou seja, a constante q é omitida:

$$y = mx \quad (4.2)$$

De acordo com a Figura 29, toma-se $P_0(x_0, y_0)$ como ponto inicial. As coordenadas dos demais pontos são calculadas em função de P_0 . Desta forma, tem-se que P_1 e P_2 , os centróides dos respectivos hexágonos na Figura 29, são dados por:

$$P_1 = (x_0 + \sqrt{3}a_0, y_0) \quad (4.3)$$

$$P_2 = \left(x_0 + \frac{\sqrt{3}}{2}a_0, y_0 + \frac{3}{2}a_0\right) \quad (4.4)$$

O objetivo da demonstração é obter as distâncias dos centróides à reta mostrada na Figura 29. Pode-se observar ainda que as distâncias d_1 e d_2 , em função das coordenadas

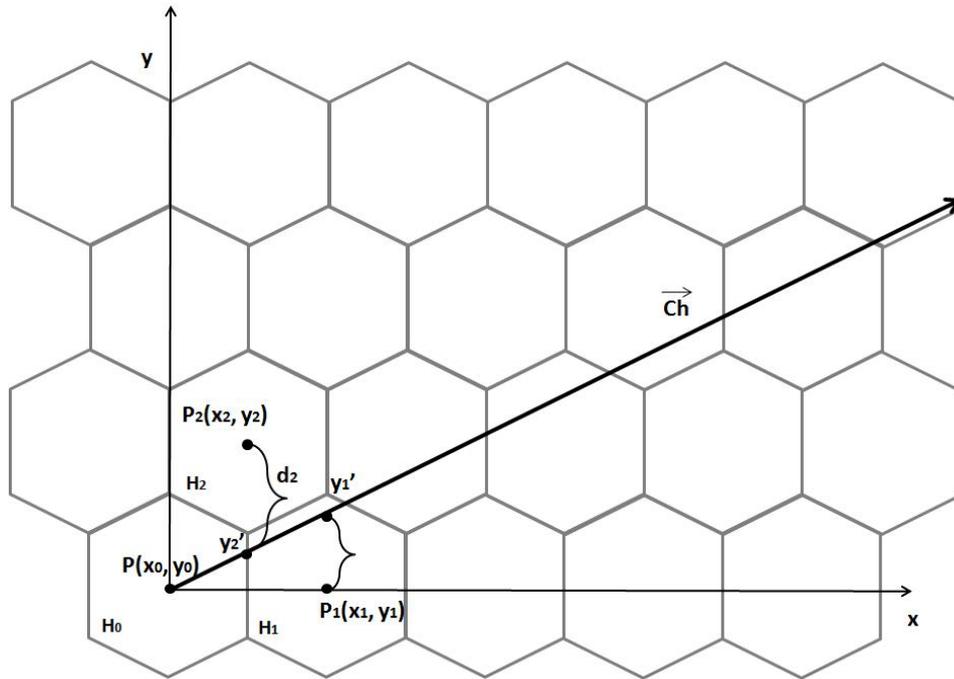


Figura 29: Definição dos pontos P_1 e P_2 e suas distâncias em relação à reta representada pelo vetor chiral \vec{C}_h . Enumeração dos hexágonos H_0 , hexágono inicial, H_1 e H_2 e seus respectivos centróides.

y dos pontos P_1 e P_2 , são dadas por:

$$d_1 = y'_1 - y_1 \quad (4.5)$$

$$d_2 = y_2 - y'_2 \quad (4.6)$$

As coordenadas de y'_1 e y'_2 são obtidas através da substituição de x_1 e x_2 na Equação 4.2. Define-se P_k de coordenadas (x_k, y_k) como ponto genérico da k -ésima iteração:

$$y'_1 = m(x_k + \sqrt{3}a_0) \quad (4.7)$$

$$y'_2 = m(x_k + \frac{\sqrt{3}}{2}a_0) \quad (4.8)$$

Substituindo as Equações 4.7 e 4.8 em 4.5 e 4.6, respectivamente, assim como as coordenadas de y_1 e y_2 , tem-se que:

$$d_1 = m(x_k + \sqrt{3}a_0) - y_k \quad (4.9)$$

$$d_2 = (y_k + \frac{3}{2}a_0) - m(x_k + \frac{\sqrt{3}}{2}a_0) \quad (4.10)$$

Para os valores de d_1 e d_2 , observa-se que (Fig. 28):

$$\begin{cases} \text{se } d_1 \geq d_2, \text{ opta - se por } H_2 \\ \text{se } d_2 > d_1, \text{ opta - se por } H_1. \end{cases} \quad (4.11)$$

A diferença entre as distâncias é dada por:

$$d_1 - d_2 = m(x_k + \sqrt{3}a_0) - y_k - (y_k + \frac{3}{2}a_0 - m(x_k + \frac{\sqrt{3}a_0}{2})) \quad (4.12)$$

onde o sinal da diferença $d_1 - d_2$ é equivalente a escolha feita na desigualdade 4.11.

Um parâmetro de decisão p_k para a k -ésima iteração é definido rearranjando a Equação 4.12. A substituição de $m = \frac{\Delta y}{\Delta x}$, onde Δy e Δx são as variações das coordenadas de x e y , é feita multiplicando os termos da Equação 4.12 por Δx :

$$\begin{aligned} p_k &= \Delta x(d_1 - d_2) \\ &= 2x_k\Delta y + \Delta y\sqrt{3}a_0 + \Delta y\frac{\sqrt{3}}{2}a_0 - 2y_k\Delta x - \frac{3}{2}a_0\Delta x \end{aligned} \quad (4.13)$$

Rearranjando a Equação 4.13, tem-se que:

$$p_k = 2x_k\Delta y - 2y_k\Delta x + (3\Delta y\frac{\sqrt{3}}{2}a_0 - \frac{3}{2}a_0\Delta x) \quad (4.14)$$

onde os dois últimos termos não se encontram em função de x_0 e y_0 .

Essa característica torna estes constantes entre as iterações, sendo agrupados na constante c :

$$p_k = 2x_k\Delta y - 2y_k\Delta x + c \quad (4.15)$$

Esta constante c será utilizada para o cálculo inicial de p_k , já que as coordenadas do ponto inicial são $P_0(0, 0)$.

Os valores de x_k e y_k mudam no decorrer da execução do algoritmo, podendo-se obter o valor do incremento entre duas iterações. No passo $k+1$, o parâmetro de decisão p_{k+1} é dado por:

$$p_{k+1} = 2x_{k+1}\Delta y - 2y_{k+1}\Delta x + c \quad (4.16)$$

Aplicando a diferença entre p_k e p_{k+1} :

$$p_{k+1} - p_k = 2\Delta y(x_{k+1} - x_k) - 2\Delta x(y_{k+1} - y_k) \quad (4.17)$$

Na Equação 4.17, tem-se a iteração $k+1$ em função da iteração anterior, mais um

incremento:

$$p_{k+1} = p_k + 2\Delta y(x_{k+1} - x_k) - 2\Delta x(y_{k+1} - y_k) \quad (4.18)$$

Nas seções seguintes, a Equação 4.18 é analisada quando é feita a escolha entre H_1 e H_2 .

4.3.1 Primeiro Hexágono - H_1

De acordo com a Figura 30, suponha que o hexágono H_1 tenha sido escolhido.

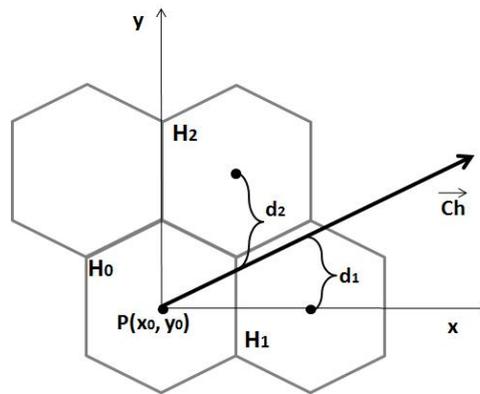


Figura 30: Exemplo de situação onde o hexágono H_1 é escolhido. A distância d_1 entre o centróide de H_1 e a reta é menor que d_2 .

Analisando as diferenças de $x_{k+1} - x_k$ e $y_{k+1} - y_k$ em função das coordenadas dos centróides de H_1 , na Equação 4.18:

$$x_{k+1} - x_k = \sqrt{3}a_0 \quad (4.19)$$

$$y_{k+1} - y_k = 0 \quad (4.20)$$

Substituindo estes resultados na Equação 4.18:

$$p_{k+1} = p_k + 2\Delta y\sqrt{3}a_0 \quad (4.21)$$

Portanto, o valor encontrado na Equação 4.21 representa quanto o parâmetro p_k será incrementado se, ao avançar uma iteração, optar-se pelo hexágono H_1 .

4.3.2 Segundo Hexágono - H_2

Supondo que seja escolhido o hexágono H_2 , como mostrado na Figura 31. É feita a mesma análise da Seção 4.3.1, onde:

$$x_{k+1} - x_k = \frac{\sqrt{3}}{2}a_0 \quad (4.22)$$

$$y_{k+1} - y_k = \frac{3}{2}a_0 \quad (4.23)$$

Substituindo estes resultados na Equação 4.18:

$$p_{k+1} = p_k + \Delta y \sqrt{3}a_0 - 2\Delta x \frac{3}{2}a_0 \quad (4.24)$$

Portanto, a expressão encontrada em 4.24, representa o incremento entre duas iterações, caso o hexágono H_2 seja escolhido.

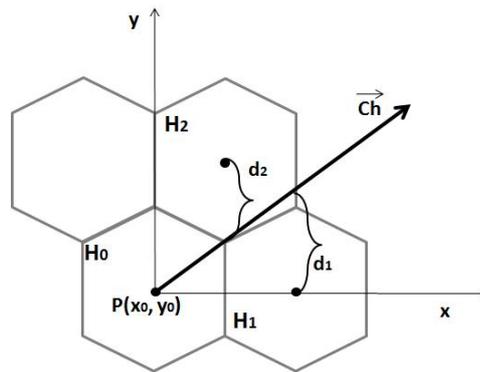


Figura 31: Exemplo de situação onde o hexágono H_2 é escolhido. A distância d_2 entre o centróide de H_2 e a reta é menor que d_1 .

4.4 Conclusões

Concluídas as demonstrações, de acordo com as Equações 4.21 e 4.24, tem-se que a iteração $k+1$ em função da iteração k é dada por:

$$p_{k+1} = \begin{cases} p_k + 2\Delta y \sqrt{3}a_0 & \text{se } p_k < 0. \\ p_k + \Delta y \sqrt{3}a_0 - 2\Delta x \frac{3}{2}a_0 & \text{se } p_k \geq 0. \end{cases} \quad (4.25)$$

Deve-se definir ainda o ponto inicial, ou seja, o centróide do hexágono H_0 para a

aplicação do método. Este ponto é definido como a origem do plano xy . Os vértices do hexágono são calculados a partir do centróide através de relações trigonométricas (Fig. 32).

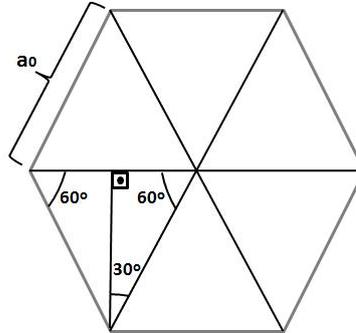


Figura 32: Algumas propriedades trigonométricas podem ser observadas para o cálculo de pontos relevantes do hexágono, como o centróide ou os vértices.

Com relação aos índices de Hamada (n, m) (Sec. 2.2), levando-se em conta que n é o fator multiplicador do vetor \vec{a}_1 , de acordo com a definição do vetor chiral (Sec. 2.2.1), este passa a representar o número de hexágonos escolhidos na direção de \vec{a}_1 , como pode ser observado na Figura 4.4. Com isso, define-se que o incremento em n é feito quando é escolhido o hexágono H_1 .

Analogamente, os incrementos de m , fator multiplicador do vetor \vec{a}_2 no vetor chiral (Sec. 2.2.1), correspondem ao número de vezes que o hexágono H_2 foi escolhido (Fig. 4.4).

De acordo com a definição dos índices de Hamada (Sec. 2.2), observa-se que o hexágono H_2 da Figura 4.4 não se encontra numerado. Caso fosse escolhido, este hexágono não poderia ser renderizado, já que isso violaria as condições de n e m , onde $n \geq m$. Este fato leva a observação de que, se esta restrição de n e m fosse suprimida do algoritmo, uma malha recíproca seria criada, o que levaria a um gasto computacional desnecessário.

Diante das propriedades dos índices de Hamada e dos hexágonos escolhidos no algoritmo proposto para o traçado de retas em malhas hexagonais, pode-se observar que o ponto final do algoritmo também é facilmente obtido, ou seja, são conhecidos, à partir do ponto inicial, o número de incrementos feito em x e o número de incrementos feito em y . Desta forma, a multiplicação de m pelo número de incrementos em y fornece a coordenada y do ponto final e a multiplicação dos incrementos em x fornece o valor da

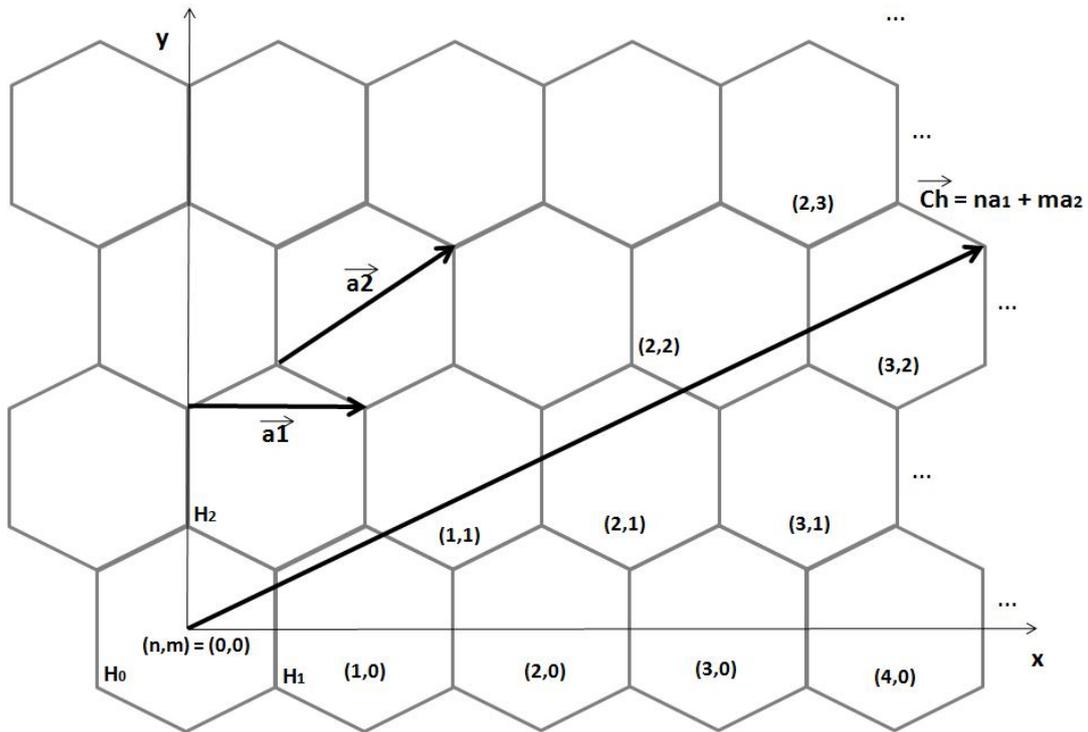


Figura 33: Esquema da numeração da malha hexagonal que auxilia na visualização da relação existente entre o algoritmo descrito neste capítulo e os índices de Hamada. Ressaltando as restrições impostas por (n,m) para a geração dos hexágonos, à exemplo do hexágono H_2 , onde $(0,1)$ violaria esta condição.

coordenada x .

Com as características apresentadas anteriormente, algumas informações podem ser deduzidas. A primeira delas é a forma de contagem do número de iterações executadas, ou seja, o número de hexágonos gerados. No algoritmo de Bresenham original, o critério de parada é o ponto que deve ser atingido. No caso dos nanotubos, o critério de parada é o número de hexágonos gerados, ou seja, a soma dos hexágonos gerados na direção de \vec{a}_1 e os hexágonos na direção de \vec{a}_2 . Com essas propriedades definidas, torna-se fácil a aplicação do método.

4.5 Algoritmo de Traçado em Malhas Hexagonais

Esta seção apresenta a visão geral do método segundo as demonstrações feitas neste capítulo.

De acordo com os valores calculados para os pontos inicial e final são obtidos as constantes Δx e Δy . A distância e os valores das coordenadas x e y são inicializadas a

partir dos mesmos pontos. Feito isso, o número de hexágonos é inicializado como zero e o método é iniciado.

O algoritmo consiste de um laço onde os hexágonos H_1 e H_2 são desenhados com objetivo de minimizar o erro existente em relação a reta original representada pelo vetor chiral. Baseado na escolha do hexágono, o parâmetro de decisão p_k é incrementado, assim como os valores das coordenadas x e y . Logo em seguida, a partir dos valores de x e y (centróide atual) são calculados os vértices do hexágono. Por fim, o número de hexágonos é incrementado. Essas operações são repetidas até que a condição de parada seja atingida, ou seja, o algoritmo executa $n + m$ iterações (Fig, 34).

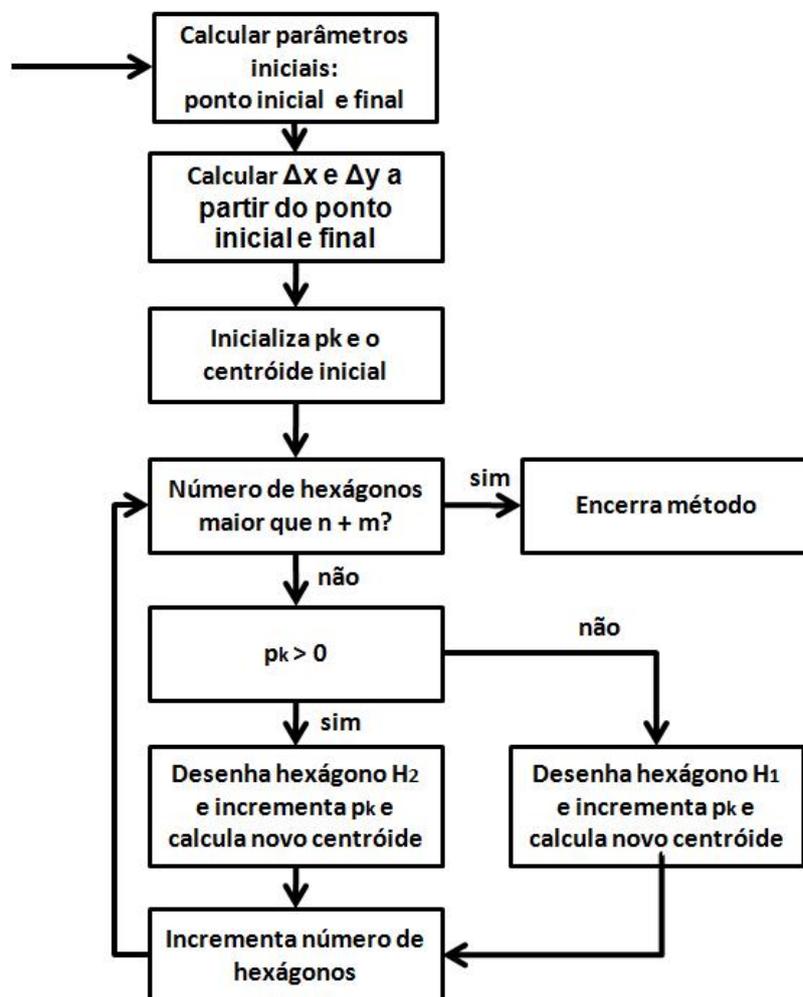


Figura 34: Diagrama representativo para o algoritmo de traçado de retas em malhas hexagonais com seus principais elementos.

5 *Aplicação*

Este capítulo descreve a implementação desenvolvida com objetivo de visualizar os resultados obtidos nos estudos teóricos.

5.1 Nanotubo - Geração e Visualização

Os nanotubos de carbono foram gerados através de um algoritmo de traçado de retas em malhas hexagonais, baseado no algoritmo de Bresenham, descrito no capítulo 4. Nesta seção são descritos os passos realizados para a geração e visualização dos nanotubos de carbono.

O nanotubo é representado por uma malha, como descrito no Capítulo 3. Os vértices e polígonos desta malha são armazenados em uma biblioteca de manipulação de malhas. Esta biblioteca permite que outras informações sejam obtidas, como número de hexágonos e vértices e as normais referentes à cada vértice.

Os nanotubos são gerados a partir do algoritmo de traçado de retas em malhas hexagonais onde cada execução do algoritmo gera uma reta, ou no caso do formato cilíndrico, um anel como observado na Figura 35. Cada anel é gerado de forma específica para cada tipo de nanotubo. A Figura 36 apresenta um anel para nanotubo do tipo *armchair*, a Figura 37 para um nanotubo do tipo *zigzag* e, no caso dos nanotubos *chirais*, o algoritmo é capaz de diferenciar o anel de acordo com a chiralidade, como visto nas Figuras 38 e 39.

5.1.1 Cálculo dos Vértices

O primeiro passo da geração dos nanotubos consiste no cálculo dos vértices de cada hexágono que compõem a malha hexagonal.

De acordo com a referência da Seção 4.5, os vértices de cada hexágono são calculados a partir de somas e subtrações em relação ao centróide. Desta forma, os vértices dependem

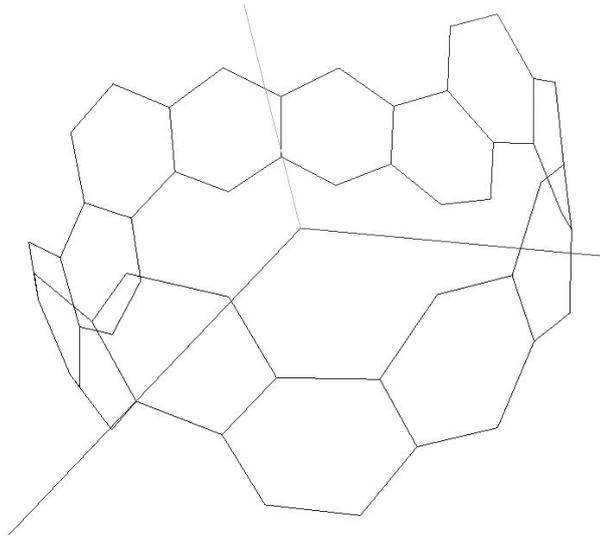


Figura 35: Anel gerado pelo algoritmo de traçado de retas para um nanotubo com índices de Hamada $(10,3)$.

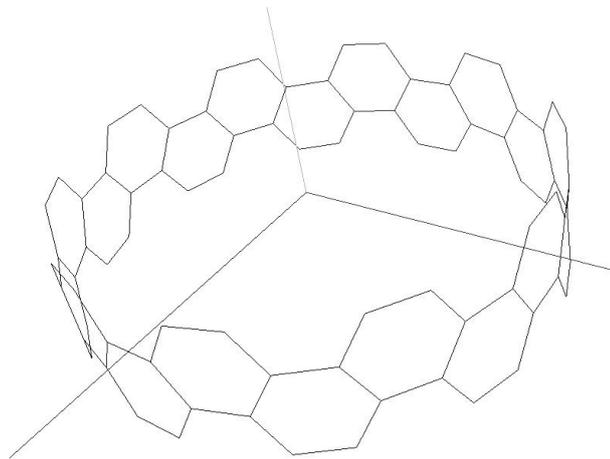


Figura 36: Anel gerado para um nanotubo do tipo *armchair* com índices de Hamada $(10,10)$.

somente do valor do centróide definido pelo algoritmo.

5.1.2 Tratamento de vértices redundantes

O cálculo dos vértices descrito na Seção 5.1.1 permite que seja obtida toda a malha necessária para a geração do nanotubo. No entanto, é preciso tratar os vértices que são gerados de forma redundante. Este fato pode ser observado na Figura 40, onde estão destacados alguns dos vértices que são compartilhados entre dois ou mais hexágonos.

Este tratamento poderia ser feito na própria biblioteca de manipulação de malhas.

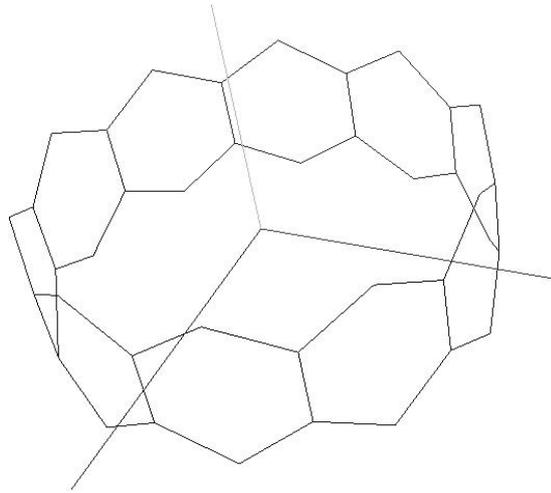


Figura 37: Anel gerado para um nanotubo do tipo *zigzag* com índices de Hamada $(10,0)$.

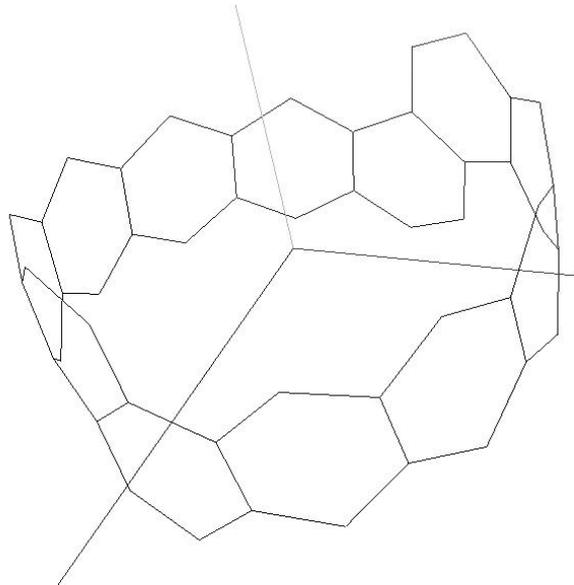


Figura 38: Anel gerado para um nanotubo do tipo *chiral* com índices de Hamada $(10,2)$.

Porém, como esta foi desenvolvida com intuito de ser a mais geral e abrangente possível, o tratamento de vértices redundantes consiste em, para cada vértice adicionado, buscar em todos os demais algum que seja coincidente. Para o caso dos nanotubos, isto tornou-se um problema, diminuindo a escalabilidade do algoritmo. Por isso optou-se por implementar estas correspondências entre os vértices de dois ou mais hexágonos diretamente na função de geração, sendo representados por uma sequência de testes lógicos, onde os vértices são armazenados e reaproveitados entre um hexágono e outro, de acordo com a formação do nanotubo.

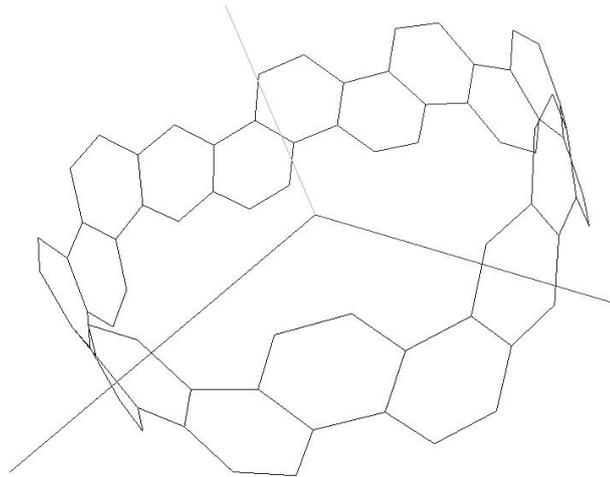


Figura 39: Anel gerado para um nanotubo do tipo *chiral* com índices de Hamada $(10,8)$.

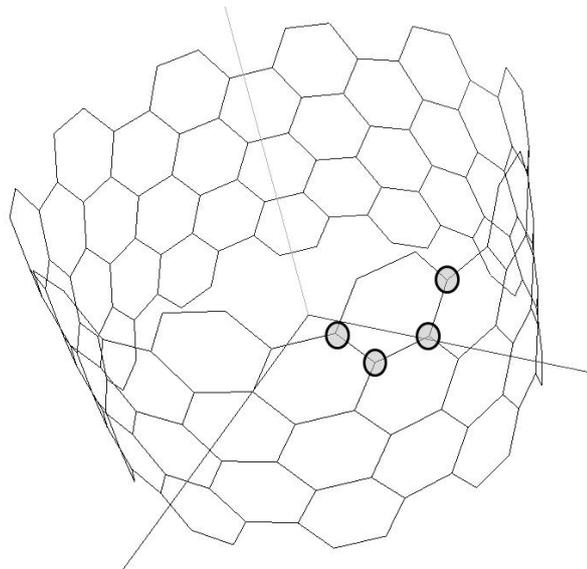


Figura 40: Destaque de alguns vértices compartilhados entre um ou mais hexágonos.

Este tratamento permite um ganho considerável, tanto no aspecto de ocupação de memória, como na velocidade de geração e visualização. Além de manter a coerência, facilita a manipulação da malha (Fig. 41).

5.2 Resultados

Nesta seção são apresentados alguns resultados obtidos a partir da aplicação. Na Figura 42, são apresentados nanotubos dos tipos *armchair*, *chiral* e *zigzag*, respectivamente.

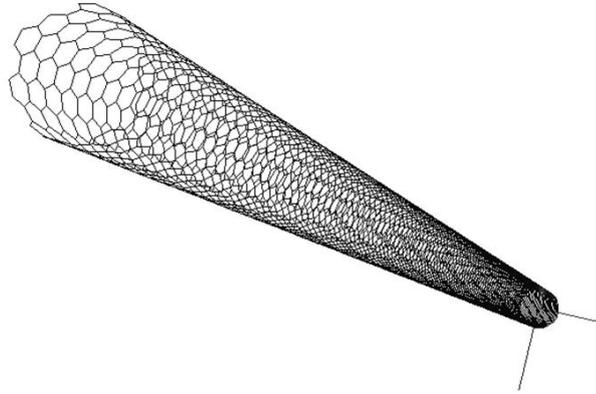


Figura 41: Nanotubo do tipo chiral de índices $(10,7)$. Sem o tratamento dos vértices redundantes este nanotubo apresenta 10200 vértices, já com o tratamento tem-se 3434 vértices.

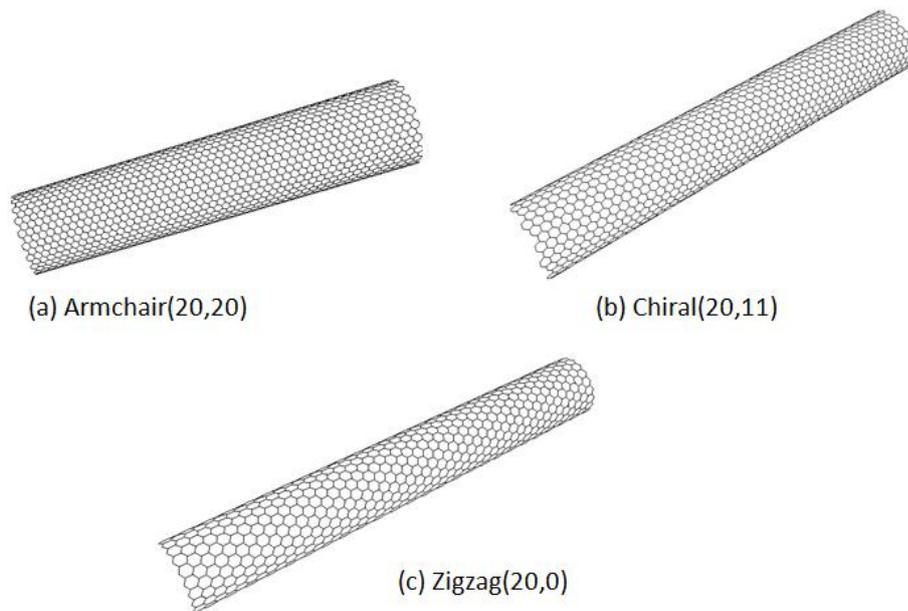


Figura 42: (a) Nanotubo *armchair* gerado a partir do índices $(20,20)$. (b) Nanotubo *chiral* gerado a partir do índices $(20,11)$. (c) Nanotubo *zigzag* gerado a partir do índices $(20,0)$.

5.2.1 Nanoestruturas

Apesar do foco deste trabalho ser a geração de nanotubos de carbono no formato cilíndrico, na natureza são encontradas diversas outras configurações de nanoestruturas de carbono. A geração de nanotubos no formato cilíndrico servirá de base para as demais estruturas.

Nesta seção são mostradas algumas dessas estruturas que ainda serão aprimoradas e refinadas em trabalhos futuros.

Na Figura 43 é observado o nanotubo no formato de um toro. Este foi construído a partir das coordenadas de um nanotubo no formato cilíndrico. Um ajuste que precisa ser feito nesta estrutura é o distanciamento dos átomos de carbono que não é mantido coerente com a aplicação simples da equação do toro. O mesmo é válido para a construção da hélice a partir do nanotubo no formato cilíndrico(Fig. 44).

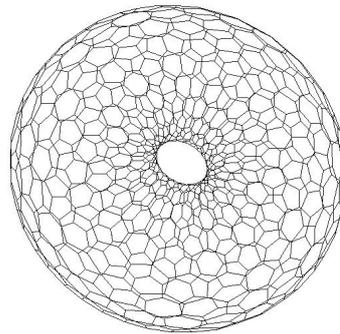


Figura 43: Toro construído a partir de um nanotubo *armchair* com índices $(10,10)$.

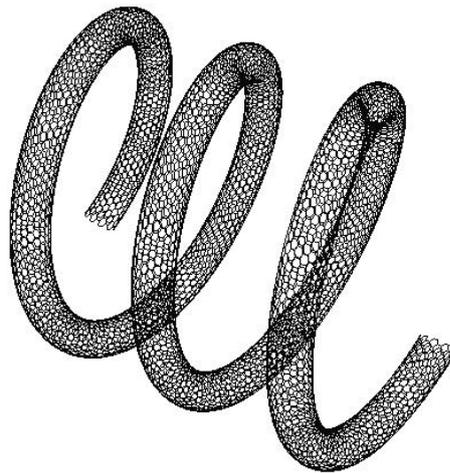


Figura 44: Hélice construída a partir de um nanotubo *armchair* com índices $(10,10)$.

5.3 Visualização com energia

A forma de visualização é fundamental para evidenciar as características do sistema. Desta forma, optou-se por utilizar o cálculo de energia como forma de apresentar as nanoestruturas de carbono.

O cálculo do potencial de interação intermolecular é feito através do potencial de *Lennard-Jones* (STUART; TUTEIN; HARRISON, 2002) de acordo com a seguinte equação:

$$V_{ij}^{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (5.1)$$

Com este cálculo foi possível evidenciar os ajustes necessários na estrutura do toro e da hélice apresentados na Seção 5.2.1. Na Figura 45 as cores mais próximas de vermelho simbolizam áreas de energia mais alta e as cores mais próximas de azul às de energia mais baixa. As regiões onde as cores se aproximam de vermelho são as áreas onde a distorção foi maior, ou seja, a região onde os hexágonos que devem ser ajustados para manter a regularidade da distância entre os átomos.

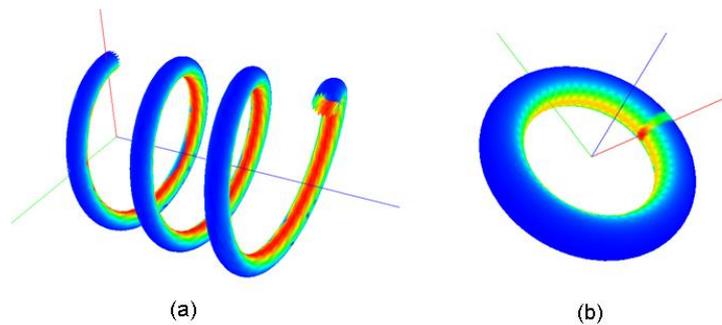


Figura 45: (a) Hélice com a distribuição de energia evidenciando a parte que sofreu maior distorção. (b) Toro com a distribuição de energia onde é possível observar que a região central sofreu maior distorção.

Vale ressaltar que na Figura 45(b) a região vermelha corresponde aos vértices que não são encaixados perfeitamente quando é aplicada a equação do toro. Esse fato fica evidente com a aplicação do cálculo de potencial, já que nestes pontos existem maior proximidade dos vértices.

6 Conclusão

Através do desenvolvimento deste trabalho foi possível observar a importância de uma modelagem eficiente para nanoestruturas de carbono. Este estudo foi motivado pelo grande enfoque existente nesta área para pesquisa e desenvolvimento de novas tecnologias e produtos.

Durante o trabalho foram pensadas diferentes abordagens para a modelagem dos nanotubos de carbono. A aplicação de um algoritmo de computação gráfica, o algoritmo de Bresenham, para este fim apresentou-se como a melhor opção para que fossem alcançadas as diretrizes iniciais. Esta forma de geração permitiu maior controle quanto à precisão e manipulação. Este método foi aliado à modelagem geométrica dos nanotubos e as suas implicações para geração.

Foi constatado que a utilização do algoritmo de Bresenham aplicado à malha hexagonal não é suficiente para modelagem de estruturas mais complexas. Contudo, esse mostrou-se como um excelente enumerador para a folha de grafeno, ou seja, é muito mais simples percorrer a folha de grafeno, acelerando a geração de nanoestruturas.

Um aspecto importante deste trabalho é a utilização do conceito de *half-edges* para a manipulação das malhas. Este conceito permite que a malha seja percorrida de forma eficiente e que as estruturas sejam facilmente identificadas. Desta forma, é possível aumentar a complexidade das estruturas, além de manter o algoritmo escalável, com menor custo computacional.

6.1 Trabalhos Futuros

Após o desenvolvimento desta modelagem é possível trabalhar diversos outros aspectos. Uma primeira abordagem para estes estudos é a modelagem de estruturas mais complexas. O início deste estudo foi apresentado no capítulo 5. No entanto, alguns ajustes ainda precisam ser feitos, dentre eles a coerência da distância entre os átomos de

carbono. Outra forma de aumentar a complexidade das estruturas é utilizar junções entre nanotubos(Fig. 46)(ZSOLDOS et al., 2004).

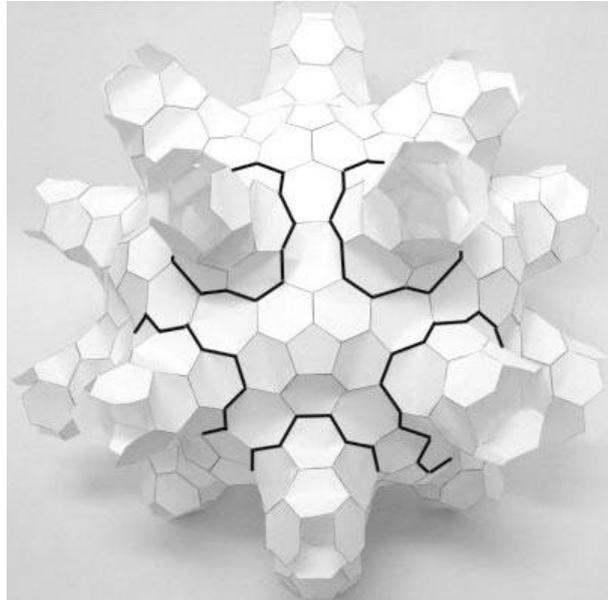


Figura 46: Exemplo de junção com 10 conexões para nanotubos *armchair* e 10 para nanotubos *zigzag* (ZSOLDOS et al., 2004).

Outro aspecto que pode ser tratado é o cálculo da energia de cada átomo. Além de permitir a melhor visualização, com a aplicação de cores distintas para energias, será fundamental para o tratamento das simulações. Estas simulações podem auxiliar na análise de diversas propriedades físicas, como resistência e condutividade elétrica.

Ainda no nível de modelagem, pode-se pensar em uma forma de operar as nanoestruturas, ou seja, combinar estas estruturas em uma espécie de álgebra. Esta abstração é fundamental para que cientistas de outras áreas possam manipular e montar outras estruturas. As junções são fundamentais para esta forma de manipulação.

Após a realização destes trabalhos é possível direcionar o estudo para as simulações físicas sobre os elementos modelados. É nesta etapa do trabalho que diversas características da modelagem se tornaram evidentes, como a eficiência e escalabilidade.

Referências

- ALEXANDER, J. W. The combinatorial theory of complexes. *The Annals of Mathematics*, Annals of Mathematics, v. 31, n. 2, p. 292–320, 1930. ISSN 0003486X. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1968099>>.
- BOUCKAERT, L. P.; SMOLUCHOWSKI, R.; WIGNER, E. Theory of brillouin zones and symmetry properties of wave functions in crystals. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 50, n. 1, p. 58–67, Jul 1936.
- BRESENHAM, J. E. Algorithm for computer control of a digital plotter. ACM, New York, NY, USA, p. 1–6, 1962.
- FERREIRA, M. de O. L. *Estruturas de Dados Topológicas Para Variedades de Dimensão 2 e 3*. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2006.
- HINOJOSA, P. A. A. *Efeitos de fonte precursora no controle da dopagem e ambiente químico em nanotubos de carbono dopados com nitrogênio*. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2007.
- HOPPE, H. et al. Mesh optimization. *Computer Graphics*, v. 27, n. Annual Conference Series, p. 19–26, 1993. Disponível em: <<http://citeseer.ist.psu.edu/hoppe93mesh.html>>.
- IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, v. 354, p. 56–58, November 1991. Disponível em: <http://adsabs.harvard.edu/cgi-bin/nph-bib_query?bibcode=1991Natur.354...56I>.
- KHARISSOVA, O. V.; RANGEL-CARDENAS, J.; CASTA, M. G. Structural computing of hamada parameters for carbon nanotubes processed by microwave heating. *Innovative Computing ,Information and Control, International Conference on*, IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, USA, v. 0, p. 357, 2007.
- LEITE, C. F. *Estudo de Elétrons e Fônons em Nanotubos de Carbono por Espalhamento Raman Ressonante*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2005.
- LICKORISH, W. Simplicial moves on complexes and manifolds. *GEOM.TOPOL.MONOGR.*, v. 2, p. 299, 1999. Disponível em: <<http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:math/9911256>>.
- NEWMAN, M. H. A. *On the foundations of combinatorial analysis situs*. [S.l.]: Proceedings of Royal Academy of Amsterdam, 1926.
- PACHNER, U. P.I. homeomorphic manifolds are equivalent by elementary shellings. *Eur. J. Comb.*, Academic Press Ltd., London, UK, UK, v. 12, n. 2, p. 129–145, 1991. ISSN 0195-6698.

PERALTA-INGA., Z. et al. Density functional tight-binding studies of carbon nanotube structures: Second southern school on computational chemistry. *Structural Chemistry*, v. 14, p. 431–443(13), 2003. Disponível em: <<http://www.ingentaconnect.com/content/klu/stuc/2003/00000014/00000005/00471248>>.

STUART, S. J.; TUTEIN, A. B.; HARRISON, J. A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. *Journal of Chemical Physics*, 2002.

VELHO, L. Mesh simplification using four-face clusters. *Shape Modeling and Applications, International Conference on*, IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, USA, v. 0, p. 0200, 2001.

VIEIRA, A. W. et al. Fast stellar mesh simplification. *SIBGRAPI*, IEEE Press, p. 8, 2003.

ZSOLDOS, I. et al. Geometric construction of carbon nanotube junctions. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, v. 12, n. 6, p. 1251–1266, 2004. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0965-0393/12/1251>>.