

Simulação computacional de líquidos moleculares via método híbrido Monte Carlo/Mecânica Quântica

Tamires C. da S. Ribeiro*, Tarciso S. de Andrade Filho, Jordan Del Nero

Universidade Federal do Pará, Faculdade de Física

66075-110, Belém, PA

E-mail: tamires@ufpa.br

RESUMO

Nosso trabalho consiste no estudo de líquidos moleculares através de simulações computacionais utilizando o método híbrido Monte Carlo/ Mecânica Quântica (MC/MQ). Abordaremos a simulação do sistema líquido formado pelas moléculas da harmana e da água, onde as moléculas de harmana, em sua forma catiônica e neutra foram utilizadas como soluto e as moléculas de água como solvente. O principal objetivo deste trabalho é simular o espectro de absorção destes líquidos comparando-o com seus respectivos resultados experimentais comprovando assim a eficiência do método.

A molécula da harmana (1-methyl-9-H-pyrido- [3,4-b]-indole), soluto do líquido, é uma substância da família dos alcalóides que se origina da molécula de β -carbonila. Utilizamos a água como solvente por ser universal e possuir alta contribuição dipolar.

Para a obtenção das estruturas de soluto em estado fundamental, fizemos a otimização geométrica através do método DFT (Density Functional Theory) utilizando funcional híbrido B3LYP (Becke, three-parameter, Lee-Yang-Parr) e o conjunto de bases gaussianas 6-311++G (d, p). A simulação em líquido foi desenvolvida no programa computacional DICE e foi dividida em dois estágios: termalização e equilíbrio. O estágio de termalização é o estágio que determina a energia interna mínima do sistema. O estágio de equilíbrio corresponde ao estágio estacionário onde são calculadas as propriedades termodinâmicas e estruturais do sistema. Ressaltamos que toda a simulação foi

realizada em ensemble NVT (onde o número de moléculas, o volume da caixa e a temperatura foram mantidos constantes) e com o algoritmo de Metropolis. As informações geradas no estágio de equilíbrio viabilizaram o cálculo de absorção através do método quântico semi-empírico INDO/CIS (Intermediate Neglect of Differential Overlap/ Configuration Interaction Single excitation).

Os cálculos de absorbância foram efetuados sobre as configurações da primeira camada de solvatação dos líquidos. Para o líquido em que o soluto era a harmana catiônica calculamos o valor de 370 nm, e para o líquido no qual a harmana neutra era o soluto encontramos a média de 327 nm. Comparando com o resultado experimental [1], de 370 nm para a harmana catiônica e na faixa de 280 nm a 350 nm para a harmana neutra, nossos resultados confirmam a eficiência e confiabilidade dos métodos empregados, para o estudo de sistemas líquidos.

Referências

- [1] J.M. de Souza, "Long-lived emission at room temperature of harmane dispersed in poly (acrylic acid)-poly (vinyl alcohol) polymer network", *Journal of Luminescence* 81, pp. 225-229, 1999.
- [2] K. Coutinho, S. Canuto, DICE: A Monte Carlo Program for Molecular Liquid Simulation, University of São Paulo, 1997.
- [3] M.C. Zerner, ZINDO: A semi-empirical program package, University of Florida, Gainesville, FL 32611, 1999.

* bolsista de Iniciação Científica PIBIC/CNPq