

288

ASPECTOS DO SISTEMA AGUA-ÍON COM ADIÇÃO DE DMSO. Emanuele Lazzaretti Cordova Campelo, Paulo F B Goncalves, Raquel Leviski da Silva, Hubert Karl Stassen (orient.) (UFRGS).

A Dinâmica Molecular (DM) dos sistemas líquidos água-sódio-cloreto e DMSO-água-sódio-cloreto foi estudada com o NAMD¹, e as Funções de Distribuição Radiais ($g(r)$ ou FDR) foram feitas com o gOpenMol^{2, 3}. O primeiro sistema (contendo 1704 moléculas de água, 12 átomos de sódio e 12 de cloreto) foi simulado por 254 ps, o segundo (contendo 864 moléculas de Dimetilsulfóxido (DMSO), 840 de água, 12 átomos de sódio e 12 de cloreto) foi simulado por 110 ps; ambos com passo de integração de 1, 5 fs e número total de moléculas igual a 1728. A comparação das FDRs dos dois sistemas mostra que a presença do DMSO não apresenta impacto na disposição do sistema. Usando o átomo de oxigênio da água como referência, nos dois casos as distâncias mais prováveis foram idênticas: para o sódio, 2, 2 Å; para o cloro, 3, 1 Å e para outro oxigênio da água, 2, 7 Å. Além dessas, a distância mais provável sódio-cloro também foi a mesma, de 2, 5 Å. Com exceção da interação com o íon cloreto, o DMSO e a água se comportam de maneira bastante parecida. O que pode ser explicado pelo caráter eletropositivo dos hidrogênios da água, mais forte que o das metilas do DMSO. Embora ambas as moléculas apresentem significativo momento de dipolo, a solvatação do cloreto pelo hidrogênio da água é mais eficiente, tornando a interação água-cloreto mais intensa, e a distância é menor. Referências: 1. Laxmikant Kalé, Robert Skeel, Milind Bhandarkar, Robert Brunner, Attila Gursoy, Neal Krawetz, James Phillips, Aritomo Shinozaki, Krishnan Varadarajan, and Klaus Schulten. NAMD2: Greater scalability for parallel molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1999, 151, 283. 2. Laaksonen, L. A graphics program for the analysis and display of molecular dynamics trajectories. *J. Mol. Graph.* 1992, 10, 33. 3. Bergman, D.L., Laaksonen, L., and Laaksonen, A. Visualization of solvation structures in liquid mixtures. *J. Mol. Graph. Model.* 1997, 15, 301.