

003

**SIMULAÇÃO DE DINÂMICA DE SOLVATAÇÃO DE METANO EM DMSO (DIMETIL SULFÓXIDO) COM ALTERAÇÃO DE PARÂMETROS DO POTENCIAL DE LENNARD-JONES***Raquel da S. Leviski, Hubert K. Stassen* (Laboratório de Química Teórica, Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UFRGS)

Neste trabalho apresentamos a dinâmica de solvatação para metano dissolvido em DMSO, foi imitada a excitação do metano utilizando-se a metodologia de simulação por dinâmica molecular. Alteramos parâmetros do potencial de Lennard-Jones dos átomos constituintes do metano. Em seguida, simulou-se a reorganização do solvente através das camadas de solvatação. Os parâmetros alterados foram os seguintes: a)  $\sigma$ : relacionado com o volume efetivo de cada átomo; b)  $\epsilon$ : relacionado com o poço de potencial entre dois átomos; c)  $\sigma$  e  $\epsilon$ ; d)  $\sigma$ ,  $\epsilon$  e comprimento de ligação (a distância interatômica para os átomos de carbono e hidrogênio do metano). Espera-se que a variação desses parâmetros e suas combinações modifiquem dinamicamente a estrutura das camadas de solvatação. Uma das conseqüências dessas modificações no potencial é a variação no volume da molécula de soluto. Um aumento no diâmetro do metano causa aproximação desse com as moléculas do dimetil sulfóxido, e as interações intermoleculares passam de atrativas a repulsivas, fazendo com que haja redistribuição das moléculas do solvente em