

028

ESTUDO TEÓRICO DA DINÂMICA DE SOLVATAÇÃO PARA SOLUÇÕES DE CCL₄ EM CCL₄, Edson Bernardi, Hubert Stassen (Departamento de Físico-Química - Instituto de Química - UFRGS).

Os processos de solvatação possuem grande importância na química por esta se tratar de uma ciência que trabalha fundamentalmente em fase condensada. Estudos teóricos sobre a dinâmica de solvatação de diversos sistemas, através da dinâmica molecular, têm auxiliado na elucidação dos mecanismos de solvatação. Neste trabalho, estudamos a dinâmica de solvatação para a mistura CCl₄/CCl₄, visto que este solvente é amplamente utilizado em reações químicas. Uma molécula foi excitada, através da alteração de um parâmetro no potencial Lennard-Jones aplicado e avaliou-se a resposta do solvente para essa perturbação em termos de contribuições atrativas, repulsivas e repulsivo-atrativas no modelo de potencial. Também foram avaliadas as correlações de 2 e 3 corpos e sua influência sobre a relaxação da energia. O sistema foi composto por 256 moléculas em um ensemble NVE, na temperatura de 298K e um volume molar de $97,15 \cdot 10^{-06} \text{ m}^3/\text{mol}$. Os resultados obtidos, mostram uma forte influência das contribuições repulsivas e repulsivas-atrativas, para a relaxação da energia do sistema ao novo estado de equilíbrio. Pode-se observar também que as correlações de 2 corpos atuam de maneira decisiva no processo de solvatação. (CNPq - PIBIC - UFRGS).