

ESTUDO DA DENSIDADE
DA ÁGUA POR SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR

ANNA LUÍSA LAMONATO¹, GUILHERME VIEIRA MEIRA², LUIZ FERNANDO DA COSTA ZONETTI³

¹ Graduada em Licenciatura em Física (2018), IFSP - Campus Birigui. allamonato@yahoo.com.br.

² Graduado em Licenciatura em Física (2018) e atual licenciando em Matemática, IFSP - Campus Birigui. guilherme.v.meira@gmail.com.

³ Graduado em Física (1996) pela Universidade Estadual de Maringá, também graduado em Licenciatura Plena em Física (2003) pela Faculdade Auxilium de Filosofia, Ciência e Letras. Mestre em Física (1999) pela Universidade em São Paulo. Doutor em Biofísica Molecular (2018), UNESP, Campus São José do Rio Preto. luizfz@ifsp.edu.br

Área de conhecimento (Tabela CNPq): 1.05.01.00-2 Física Geral

Apresentado no

10º Congresso de Inovação, Ciência e Tecnologia do IFSP ou no 4º Congresso de Pós-Graduação do IFSP

27 e 28 de novembro de 2019- Sorocaba-SP, Brasil

RESUMO: O uso de computadores facilita estudos em várias áreas, entre elas a Física, a partir de simulações computacionais. Com isto, é possível analisar diversos componentes em um sistema usando a Dinâmica Molecular, responsável por criar, gerar dados, armazenar e fornecer os valores próximos dos reais sobre os sistemas envolvidos. Neste trabalho, foi realizada a Dinâmica Molecular com a água em dez sistemas, considerando a água pura, em que foi acrescentado porções de cloreto de sódio, a cada 0,05 mol/L entre 0,15 e 0,55 mol/L a fim de perceber alterações em suas características físico-químicas, tal qual a densidade. Os dados obtidos pela Dinâmica Molecular foram comparados aos números encontrados na literatura de tal forma que a densidade se assemelhou ao valor teórico. Assim, os resultados mostraram-se eficientes com os estudos através de simulações computacionais.

PALAVRAS-CHAVE: dinâmica molecular; água; densidade; simulação computacional.

THE STUDY OF DENSITY ABOUT THE WATER BY MOLECULAR DYNAMICS
SIMULATIONS

ABSTRACT: The use of computers facilitates studies in various areas, including physics, from computer simulations. With this, it is possible to analyze several components in a system using Molecular Dynamics, responsible for creating, generating data, storing and supplying the real values about the systems involved. In this work, Molecular Dynamics was performed with water in ten systems, considering pure water, in which portions of sodium chloride were added every 0.05 mol/L between 0.15 and 0.55 mol/L at order to perceive changes in their physicochemical characteristics, such as density. The data obtained by the Molecular Dynamics were compared to the numbers found in the literature in such a way that the density resembled the theoretical value. Thus, the results were efficient with the studies through computer simulations.

KEYWORDS: molecular dynamics; water; density; computational simulation.

INTRODUÇÃO

O uso de simulações computacionais é de extremo interesse em casos que as simulações concretas utilizam espaços físicos extensos, exigem determinadas situações de ambiente e necessitam um tempo determinado (ou muito grande ou muito pequeno) de simulação, podendo sofrer várias adulterações por um ou vários fatores, além de trabalhar com moléculas de tamanhos variados e a interação de várias delas, como as proteínas, a água, os sais (NAMBA; SILVA; SILVA, 2008).

Um dos objetivos deste trabalho é utilizar computacionalmente as simulações para analisar as variações da densidade de misturas de água pura e cloreto de sódio com variação da concentração de NaCl e temperatura e, assim, comparar com os valores encontrados na literatura.

Foi escolhida a água para ser analisada no trabalho, pois a substância é abundante e essencial à existência dos seres vivos, além de ter características singulares como sua densidade. A saber, densidade é a grandeza que relaciona a massa e o volume de uma substância (FOGAÇA, 2018).

E o cloreto de sódio (NaCl), conhecido como sal de cozinha, é muito utilizado na indústria alimentícia e farmacêutica e possui como característica a solubilidade em água (SILVA, 2018).

A solução desse sal com a água altera as propriedades físico-químicas da água e foi essa a análise feita por meio da dinâmica molecular, utilizando simulação computacional.

Por meio de dinâmica molecular, os valores são muito próximos do real, teórico, e o erro é menor, quanto maior o tempo de simulação, uma vez que a quantidade de passos do objeto simulado aproxima-se do objeto real.

MATERIAL E MÉTODOS

Foram utilizados apenas softwares e programas computacionais na realização das simulações, sendo estes: *Visual Molecular Dynamics* (VMD) e o *Nanoscale Molecular Dynamics* (NAMD), no sistema operacional *Linux Mint*. Com os programas, foram geradas caixas e réplicas destas caixas, preenchidas inicialmente com moléculas de água e, posteriormente, foram adicionadas moléculas de cloreto de sódio (NaCl).

Em todo este processo, foram aplicados métodos específicos (como de Condições Periódicas de Contorno e de Mínima Imagem) para otimizarem o tempo de simulação e atenuarem os erros por interação partícula-imagem (HOCKEY; EASTWOOD, 1981).

Para realizar a simulação de Dinâmica Molecular utiliza-se fundamentação na Mecânica Clássica, com cálculos de interações moleculares (NAMBA; SILVA; SILVA, 2008). As moléculas são consideradas coleções de átomos, os quais podem ser descritos por forças newtonianas, ou seja, são unidas por forças harmônicas ou elásticas (NAMBA; SILVA; SILVA, 2008).

Duas equações que expressam estas interações moleculares são:

$$F_i(t) = m_i a_i \quad (1)$$

$$F_i(t) = -\frac{\delta V(r_i)}{\delta r_i} \quad (2)$$

em que,

F_i - força atuante sobre a i -ésima partícula, N;

m_i - massa da i -ésima partícula, kg;

a_i - aceleração da i -ésima partícula, m/s².

$V(r_i)$ - energia potencial em relação à posição do átomo i , J.

A quantidade de moléculas do sistema é proporcional ao tempo necessário para a máquina executar os cálculos.

A dinâmica molecular foi executada para água pura e com as concentrações entre 0,15 e 0,55 mol por litro da solução água e cloreto de sódio. Para analisar a densidade, o valor comparado foi com a densidade da água do mar, 0,35 gramas por centímetro cúbico, e foi feita a conversão da concentração da simulação. Abaixo, na figura 1 (A) e (B), observa-se as concentrações mínima e máxima gerada no programa VMD, pelos autores.

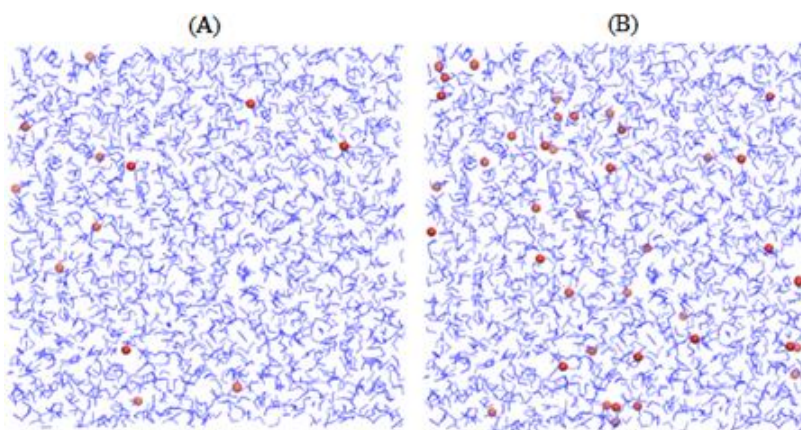


FIGURA 1 - (A): concentração de 0,15 mol/L e (B): concentração de 0,55 mol/L. Em vermelho, o NaCl. Em azul, as moléculas de H₂O.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após realizar a simulação dos dez sistemas, através do programa VMD, foram obtidos dados da dinâmica molecular. Com os valores, no programa Origin Pro 8, plotou-se o seguinte gráfico da densidade em função da temperatura, no qual as cores representam o sistema de cada concentração:

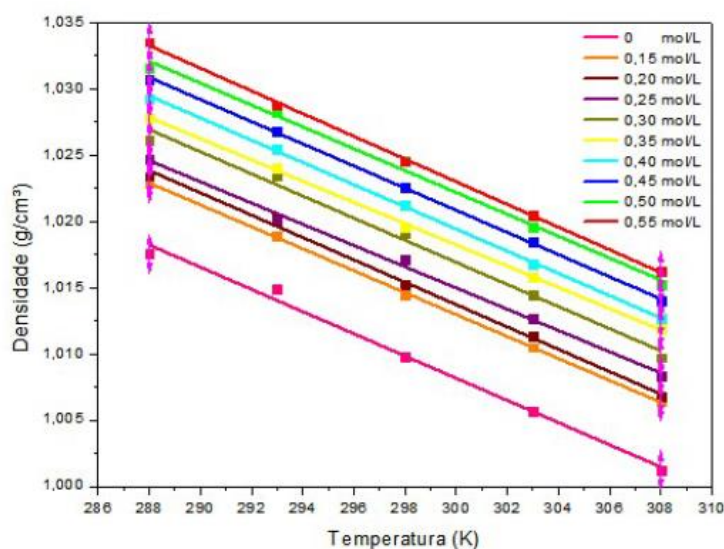


GRÁFICO 1. Gráfico da densidade pela temperatura, associando cada linha a uma concentração diferente.

O gráfico 1 representa a densidade e sua relação com a temperatura. Para a água pura, (sem nenhuma concentração de NaCl) o valor experimental obtido foi de 1,00976 g/cm³. O valor teórico utilizado para se comparar foi o de 0,997 g/cm³ (ARAÚJO apud W.L. Jorgensen, et al, 2016), a pressão de 1 atm e temperatura de 298 K. O erro experimental entre estes valores foi de 1,280%.

Agora, para efeito dos resultados, foi utilizada a temperatura de 298 K e concentração de 0,35 mol/L, cujo valor é 1,01959 g/cm³. O valor teórico da densidade do mar encontrado por meio de pesquisa bibliográfica foi 1,02337 g/cm³ (MARYTA, 2018). O erro experimental foi de apenas 0,369%.

CONCLUSÕES

Os resultados obtidos das simulações e dos cálculos para a densidade das soluções em comparação com os valores encontrados na bibliografia foram animadores com erro percentual experimental abaixo de 1%, levando em conta o tempo utilizado para as simulações.

REFERÊNCIAS

ARAÚJO, A. Suman . Aspectos teóricos e práticos de simulações de Dinâmica Molecular de sistemas biológicos, notas de aulas, 2016.

FOGAÇA, Jennifer R. V.. Densidade. Manual da Química. Disponível em: <<https://www.manualdaquimica.com/quimica-geral/densidade.htm>>. Acesso em: 25 de jun. de 2018.

HOCKEY, R. W.; EASTWOOD, J. W. Computer Simulation using Particles, McGraw-Hill, New York, 1981.

MARYTA. Propriedades Físico-químicas da água do mar. eFlora Web. Disponível em: <<http://www.efloraweb.com.br/propriedades-fisico-quimicas-da-agua-do-mar>>. Acesso em: 6 de dez. de 2018.

NAMBA, A. M., SILVA, V. B. da & SILVA, C. H. T. P. da. Molecular dynamics: theory and applications in drug design. Eclética Quím. 33, p. 13–24, 2008

SILVA, A. L. S. da. Cloreto de Sódio. Info Escola. Disponível em: <<https://www.infoescola.com/compostos-quimicos/cloreto-de-sodio/>>. Acesso em: 26 de jun. 2018.