

EXATAS E DA TERRA

MODELAGEM DE DISPOSITIVO CONVERSOR DE ENERGIA: ESTUDO DA PARAMETRIZAÇÃO LINEAR DO CONFINAMENTO EM MATÉRIA CONDENSADA E EM MACROMOLÉCULAS

APAZA CHOQUEHUANCA, Rodrigo Wenceslao.

Estudante do Curso de Engenharia de Energias Renováveis - ILATIT – UNILA;

E-mail: rodrigo.choquehuanca@aluno.unila.edu.br;

LAPAS, Luciano Calheiros

CICN – ILACVN – UNILA.

E-mail: luciano.lapas@unila.edu.br.

1 Introdução

A Simulação de Dinâmica Molecular (SDM) pode propiciar avanços nos estudos e modelagem de dispositivo conversor de energia. Mediante técnicas de SDM, o confinamento de átomos e nanopartículas em regiões termicamente ativadas pode ser analisado.

O objetivo deste trabalho é implementar e analisar o confinamento de átomos e suas relações com seus vizinhos em uma área de troca térmica por meio de SDM.

O presente trabalho é uma peça inicial de um estudo maior que permite quantificar a energia livre de compostos não-covalentes interagindo em sistemas com aplicações em biologia molecular.

2 Metodologia

As abordagens macroscópica (análise termodinâmica) e microscópica (mecânica estatística) encontrados na literatura, desenvolvem uma análise do comportamento do confinamento de partículas em um regime de interação sob efeitos térmicos. Por outro lado, estas abordagens relacionam partículas vizinhas por meio de uma parametrização, onde se indica que as energias livres interatômicas e não-covalentes são linearmente relacionadas com o ângulo sólido com que os átomos “vêm” seus vizinhos. Portanto, a parametrização responde a um tratado geométrico que contribui a descrição de flutuações atômicas para a estabilidade da organização estrutural como, por exemplo, de macromoléculas.

Por meio da SDM, implementamos no software Matlab a interação entre dois átomos para o caso 3D. Utilizamos o método de Verlet de diferenças finitas e o potencial de Buckingham para obter a dinâmica das interações. Implementamos a região de confinamento dos átomos através de elipsoides térmicos. Por simplicidade, foi adotado um volume esférico

como sendo uma região de confinamento (RC). Posteriormente, estendemos a duas RC, onde no interior de cada uma delas é confinada uma determinada quantidade de partículas. Desta forma é garantido a interação de partículas vizinhas separadas por seus esferoides de confinamento. Para garantir os efeitos de perturbação no interior de cada RC, implementamos um ruído estocástico baseado na distribuição gaussiana. Finalmente, calculamos a energia livre e o ângulo sólido baseado nas implementações anteriores.

3 Fundamentação teórica

Segundo L. Lapas *et al.* (2016), a análise mecânico-estatística de pares de átomos em macromoléculas interagentes mostra que a energia livre correspondente pode ser linearmente relacionada com o ângulo sólido com que os átomos conseguem ver aos seus vizinhos, incluindo tanto o tamanho atômico efetivo quanto o elipsoide térmicos. Isto devido a que os átomos em matéria condensada e em macromoléculas são encontrados em organizações adotando estruturas tridimensionais e confinados a flutuar em posições especificadas. Nesses sistemas, o conjunto de interações interatômicas é descrito por um produto de reações químicas simultâneas e, de acordo com uma descrição macroscópica, é esperado que a energia livre das reações interatômicas apresente um comportamento linear. Neste sentido, uma abordagem geométrica pode prever a linearidade da energia livre de Gibbs, sugerida por de la Cruz *et al.* (1992). Com a identificação da abordagem geométrica, o conhecimento do ângulo sólido relacionada com o elipsóide térmico são essenciais (Yue *et al.*, 1996). Pela similitude das equações 3D com a 1D do método de Verlet (Allen *et al.*, 1991), e do mesmo modo o potencial de Buckingham, fomos capazes de utilizar técnicas numéricas inicialmente no caso 1D para depois estender para duas ou três dimensões.

4 Resultados

São mostrados resultados gráficos das implementações realizadas para diferentes tamanhos de RCs e distâncias de separação correspondentes entre eles.

5 Conclusões

Foi utilizado a SDM para implementar a interação entre átomos vizinhos. O método adotado para a implementação da área de troca térmica de confinamento pode ser aplicado

para diferentes geometrias de confinamento. O ruído gaussiano adotado reproduz a perturbação de todo o sistema macromolecular sobre as partículas implementadas.

A energia livre da reação interação e o ângulo sólido apresentam uma relação linear para os casos analisados.

6 Principais referências bibliográficas

[1] Lapas L. C, Fita I and Rubi M., “A Linear Parametrization of Noncovalent Interatomic “Free Energies” in Condensed Matter and in Macromolecular structures”. A ser publicado.

[2] de la Cruz X., Reverter J. and Fita I., “Representation of noncovalent interactions in protein structures”, (1992).

[3] Domingues G., Volz S., Joulain K. and Greffet J. “Heat Transfer Between Two Nanoparticles Through Near Field Interaction”. (2005).

[4] Whitlow M. and Teeter M. M., “An Empirical Examination of Potential Energy Minimization Using the Well-Determined Structure of the Protein Crambim”. J. Am. Chem. Soc. (1986), 108, 7163-7172.

[5] Yue K. and Dill K. A. “Folding Proteins with a Simple Energy Function and Extensive Conformational Searching”. Protein Science (1996).

[6] Allen M. P. and Tildesley D. J., “Computer Simulation of Liquids”, (1991).