

## Estratégia de simulação para avaliação da atividade de inibidores cinéticos de clatratos de metano e água

Débora de Barros (IC), Mauro dos Santos de Carvalho (PQ)\*

Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UFRJ, CT, Bloco A, sala 411, Cidade Universitária, CEP 21949-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. \* e-mail: mauro@iq.ufrj.br

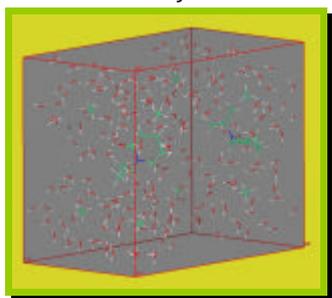
Palavras Chave: Dinâmica molecular, hidratos, análise estrutural

### Introdução

A utilização de inibidores de formação de clatratos é de grande importância para a exploração de petróleo. A avaliação da atividade de inibidores potenciais apresenta certa complexidade, devido às condições experimentais em que o fenômeno ocorre. Apresenta-se aqui uma estratégia para avaliação da atividade de potenciais inibidores, baseada em simulação computacional utilizando dinâmica molecular. O campo de forças utilizado foi o campo genérico *Dreiding II* e as cargas foram atribuídas via método *Q equilibrated*.

### Resultados e Discussão

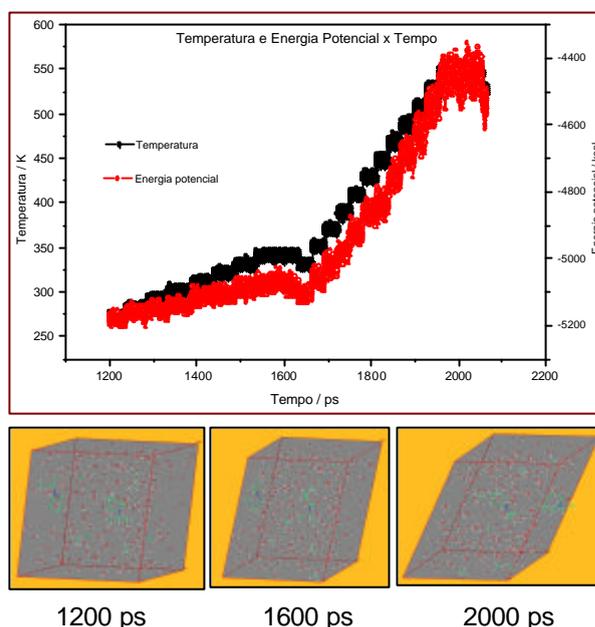
As simulações foram efetuadas em estação IBM risc 6000, com tempo total de aproximadamente dois nanossegundos, com passos de 1 femtossegundo. Inicialmente foram criados os arquivos de partida com oito moléculas de metano e quantidade estequiométrica de água para formação do clatrato e duas moléculas do inibidor. Após minimização, o sistema foi submetido a uma dinâmica NPT à temperatura de 50 K. A figura 1 mostra o resultado de menor energia desta simulação.



**Figura 1.** Arquivo de partida e menor energia da simulação 50 K.

A estrutura mostra a formação de clusters de hidratos de metano bastante nítidos e os inibidores distribuídos homogêneaemente no sistema. A partir daí, iniciou-se um aquecimento gradual do sistema até 540 K com rampas de 60 a 40 K. Nas temperaturas de 50 até 340 K o sistema não apresentou modificação estrutural, comportando-se como em estado sólido. A partir da temperatura de 350 K a estrutura inicial é perdida e inicia-se um movimento molecular mais livre, característico de um líquido, que se reflete no comportamento da energia potencial do sistema.

A figura 2 apresenta a evolução da energia potencial e da temperatura do sistema onde se pode ver o ponto crítico da energia potencial em 350 K. Abaixo estão as estruturas nos tempos indicados, onde se pode ver a modificação estrutural do sistema.



**Figura 2.** Gráfico da evolução da temperatura e energia potencial do sistema. Abaixo: estrutura do sistema nos tempos de simulação indicados.

### Conclusões

Os resultados mostram que a estratégia permite o acompanhamento da formação e inibição dos clatratos de metano e água e fornece informações bastante importantes no nível microscópico que poderão ser diretamente correlacionadas com resultados experimentais, com intuito de descobrir inibidores eficientes. A análise completa dos resultados da simulação fornecerá conhecimento sobre a natureza e descrição das interações intermoleculares, sobre as características estruturais dos clatratos, além de ser uma excelente técnica de varredura prévia de potenciais candidatos a inibidores ou catalisadores da formação de clatratos.

### Agradecimentos

CNPq/ CT-Petro