Obtenção de parâmetros Lennard-Jones do THP por ajuste de curva de energia potencial pelo método de Powell e por um algoritmo genético

Larissa Tunes da Silva[1](PG)*, José Roberto dos Santos Politi[1](PQ), Ricardo Gargano[2](PQ), Lucas Resende Salviano[2](PQ), Ismael Victor de Lucena Costa[2](PQ). *lalatunes@yahoo.com.

[1]*Laboratório de Química Computacional, Instituto de Química, Universidade de Brasília.*
[2] *Instituto de Física, Universidade de Brasília.*

Palavras Chave: *tetrahidropirano, simulação de líquidos, método de Powell, algoritmo genético, Lennard-Jones.*

Introdução

O potencial de Lennard-Jones consiste em uma descrição clássica muito difundida da interação entre moléculas, em particular em simulações computacionais de líquidos[1]. A obtenção de parâmetros de interação σ e ε que forneçam resultados satisfatórios, no entanto, é muita vezes arbitrária, pautando-se exclusivamente nos resultados finais. Neste trabalho, foram obtidos parâmetros Lennard-Jones para o tetrahidropirano, destinados a simulações computacionais, por meio de cálculos *ab initio* e ajuste de curvas de energia potencial por meio do método de Powell[2] e de um algoritmo genético[3].

Resultados e Discussão

Etapa 1. Obtenção de curva de energia potencial do dímero THP-THP. Seis conformações iniciais do dímero foram utilizadas como pontos de partida para otimizações (método HF/6-31++G**). Em cada uma das conformações obtidas, realizou-se uma varredura da distância entre as duas moléculas, tendo sido calculada a energia em cada ponto. Foram obtidas seis curvas de energia potencial. Selecionou-se, para o estudo, a que apresentou o menor valor do mínimo de energia (poço mais profundo).

Etapa 2. Descrição do sistema por meio do potencial de Lennard-Jones. O potencial de Lennard-Jones 6-12 foi utilizado para descrever a interação entre cada par possível de átomos do sistema constituído pelo dímero THP-THP, e adaptado para que dependesse apenas da distância relativa e de 4 parâmetros, denominados σ_{cc}, σ_{oo}, ε_{cc} e ε_{oo}.

Etapa 3. Ajuste da equação obtida à curva de energia potencial selecionada. O procedimento de ajuste foi realizado pelo método de Powell e por um algoritmo genético, adaptado especialmente para esta situação, com população de 10000 indivíduos por geração, total de 150 gerações e taxa de mutação de 3% a cada geração. Os resultados obtidos pelos dois procedimentos encontram-se na tabela 1 e representados graficamente na figura 1.

Tabela 1. Parâmetros e desvios quadráticos médios obtidos pelas duas metodologias.

	σ_{cc}	σ_{oo}	ε_{cc}	ε_{oo}	dqm
Powell	2,5875	6,2171	0,5843	5,9419	0,0268
Alg. Gen.	1,3331	5,3691	1,9727	4,2299	0,0912

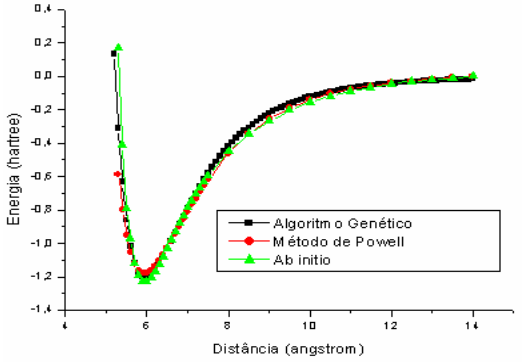

Figura 1. Curvas de potencial.

Foram obtidos resultados satisfatórios com ambos os procedimentos; os desvios são muito pequenos. O algoritmo genético apresenta a vantagem de não depender dos parâmetros iniciais; sua eficiência depende mais da intensidade do mínimo global da função com relação aos demais pontos. O ajuste por Powell exigiu mais tentativas e sucessivas alterações dos parâmetros iniciais para que se aproximasse do máximo; entretanto, apresentou um tempo computacional significativamente menor do que o algoritmo genético.

Conclusões

Os ajustes obtidos estão em excelente concordância com a curva *ab initio*: os pontos de mínimo são muito próximos e todas as curvas são assintóticas para zero. A ordem de grandeza dos parâmetros está de acordo com a esperada. Sendo assim, as próximas etapas consistirão em aplicações destes parâmetros em simulações de Monte Carlo do líquido THP.

Agradecimentos

CAPES, IQ-UnB, CNPq, FINATEC.

[1] Barlette,V.E.; Freitas, L.C.D. *Quím. Nova* **1999**, 22(2), 254.
[2] Powell, J.D. *Comput. J.* **1964**, *7(2)*, 155.

[3] McCall, J. J. *Comput. Appl. Math.* **2005**, *184*, 205.