

## Mecanismo de crescimento de complexos de van der Waals $\text{Ar}_n\text{NO}_2$ . Determinação por dinâmica molecular.

Emilio Borges\*(PQ)<sup>1</sup>, João Pedro Braga(PQ)<sup>2</sup>  
emilio.borges@ufv.br

1-Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas-Departamento de Química-Universidade Federal de Viçosa.

2-Instituto de Ciências Exatas -Departamento de Química-Universidade Federal de Minas Gerais.

Palavras Chave: Complexos de van der Waals, Dinâmica Molecular, Mecanismo de Crescimento.

### Introdução

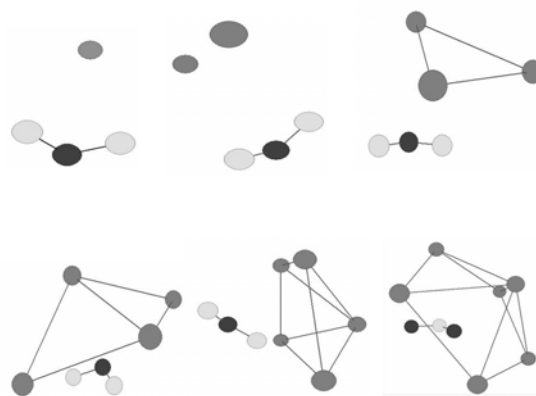
O estudo de complexos de van der Waals envolvendo moléculas ligadas a átomos de gases nobres tem sido muito desenvolvido nos últimos anos, pois esses clusters são protótipos para a descrição de interações químicas fracas. Essa descrição é fundamental, por exemplo, para a química de moléculas com interesse ambiental<sup>1</sup>, tais como  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_3$  e  $\text{NO}_2$ . Contudo, a determinação de geometrias para esses sistemas é uma área de pesquisa em que há muito a ser realizado, pois o número de mínimos locais sobre a superfície de energia potencial que governa a formação da estrutura cresce exponencialmente com o tamanho do cluster mesmo para superfícies de energia potencial relativamente simples tais como os potenciais de pares.

Nesse trabalho, desenvolve-se a simulação de estruturas estáveis e do mecanismo de crescimento dos complexos de van der Waals  $\text{Ar}_n-\text{NO}_2$  ( $n=1-6$ ). Efeitos de relaxação molecular sobre as estruturas são considerados já que uma superfície de energia potencial não rígida está sendo utilizada na simulação.

### Resultados e Discussão

O algoritmo utilizado na presente simulação pode ser dividido em duas etapas complementares; na primeira, a molécula de  $\text{NO}_2$  é centralizada em uma caixa cúbica com lados de 14 Å e as coordenadas Cartesianas para o primeiro átomo de argônio são geradas no espaço de fases dentro dessa caixa. Para cada conjunto de coordenadas **C** geradas no espaço de fases, a energia potencial é calculada. Se o grupo de coordenadas subsequentes **C+1**, originar uma energia potencial menor do que o conjunto **C** então **C+1** substitui **C**. Nessa primeira etapa foram testadas randomicamente cem mil diferentes configurações i.e conjunto de espaço de fases. A menor energia potencial encontrada é tomada como um mínimo local e suas coordenadas correspondentes constituem a estrutura preliminar do complexo de van der Waals. Em uma segunda etapa, a estrutura preliminar obtida anteriormente é utilizada como condição inicial para a propagação das equações de Hamilton, em um processo baseado em princípios da dinâmica molecular.

A estrutura encontrada no final da integração das equações de Hamilton corresponde ao mínimo global para a superfície de energia potencial<sup>2</sup>. As estruturas estáveis para os complexos de van der Waals  $\text{Ar}-\text{NO}_2$  são mostradas na figura 1.



**Figure 1.** Estruturas para os complexos de van der Waals  $\text{Ar}_n\text{NO}_2$  clusters ( $1 \leq n \leq 6$ ).

### Conclusões

Estruturas estáveis para complexos de van der Waals  $\text{Ar}_n-\text{NO}_2$  estão sendo determinadas utilizando-se um método que acopla procedimentos estocásticos a simulações por dinâmica molecular. Em um segundo momento serão investigados o mecanismo de crescimento até estruturas maiores, bem como a sensibilidade das estruturas em relação a pequenas perturbações nos parâmetros da superfície de energia potencial.

### Agradecimentos

Suporte Financeiro: CNPq

<sup>1</sup> C. Desfranc ois, S. Carles and J. P. Schermann, *Chem. Rev.*, **2000**, 100, 3943.

<sup>2</sup> E. Borges, G. G.Ferreira, J.M.Oliveira, J. P. Braga, *Chem.Phys.Lett*, **2009**, 472, 194.