

233

ESTUDO TEÓRICO DA FORMAÇÃO DE CLUSTERS EM MISTURAS ENTRE DMSO E ACETONITRILA. *Edson Bernardi, Hubert Stassen,* (Instituto de Química, Departamento de Físico-Química – UFRGS)

A simulação da dinâmica molecular têm sido utilizada para o estudo de misturas entre DMSO e acetonitrila, na fase líquida, em diversas frações molares. O modelo do líquido mantém as moléculas rígidas compostas por quatro (DMSO) e seis (acetonitrila) centros de interação, localizados sobre os átomos. As interações de Van der Waals são descritas através de um potencial do tipo Lennard-Jones, enquanto que para as interações eletrostáticas utilizamos potenciais Coulombianos. A estrutura da mistura é descrita pelas funções de distribuição radial para todas as combinações de átomos entre pares de moléculas. A análise destas funções mostra a influência da concentração sobre o sistema, com a formação de clusters transientes de DMSO e acetonitrila, mais pronunciados em misturas com fração molar pequena de um dos componentes. Utilizou-se o número de vizinhos mais próximos para a obtenção de frações molares microscópicas (clusters). As características dinâmicas das misturas são apresentadas através das funções de correlação temporal para velocidades lineares e angulares. (CNPq - PIBIC, PADCTIII, FAPERGS)