



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Dinâmica Molecular Reativa da Pirólise de Aminoácidos sob Alta Pressão
Autor	ALAN CHEQUIM ALONSO
Orientador	ANDRE RODRIGUES MUNIZ

Dinâmica Molecular Reativa da Pirólise de Aminoácidos sob Alta Pressão

Autor: Alan Chequim Alonso

Orientador: Prof. Dr. André Rodrigues Muniz

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

Estudos sugerem que cometas e asteroides podem ter trazido vida à Terra, pois contêm aminoácidos, elementos básicos para os seres vivos. Durante a entrada desses corpos celestes e seu impacto com a superfície, grandes pressões e temperaturas são geradas, portanto, são necessários estudos quanto à resistência dos compostos orgânicos a essas condições. Isto motivou a investigação experimental da pirólise dos aminoácidos L-ácido aspártico ($C_4H_7NO_4$), L-alanina ($C_3H_7NO_2$), L-leucina ($C_6H_{13}NO_2$) e alfa-glicina ($C_2H_5NO_2$) sob altas pressões, que revela a formação de estruturas amorfas ou grafiticas com variados graus de cristalinidade, sendo os materiais mais cristalinos observados para as espécies com menores frações originais de heteroátomos. No presente trabalho, foram empregadas simulações de dinâmica molecular reativa a fim de obter um melhor entendimento dos mecanismos desse processo do ponto de vista atômico, assim como para avaliar o efeito das condições (temperatura e pressão) aplicadas e da fração de heteroátomos nos aminoácidos nos parâmetros estruturais do produto final. As simulações foram conduzidas usando o software LAMMPS e o potencial reativo ReaxFF para descrição das interações interatômicas. Estas seguiram o protocolo experimental, aplicando-se, inicialmente, altas pressões aos aminoácidos em sólidos cristalinos, e em seguida, aquecendo-os até altas temperaturas, mantendo a compressão. Para a L-leucina, que possui a menor fração inicial de heteroátomos e que, experimentalmente, teve o melhor grau de grafitização, o processo foi estudado em várias temperaturas, para se obter uma melhor compreensão do efeito desse parâmetro no processo. Foi possível identificar as diferentes etapas envolvidas no processo de transformação, e como estas afetam a estrutura do sólido resultante. Observou-se, nas simulações da pirólise da L-leucina, que temperaturas mais altas favorecem a eliminação dos heteroátomos, uma vez que conferem maior energia ao sistema, e que pressões mais altas, por diminuírem as distâncias interatômicas, intensificam as reações gás-sólido e possibilitam a formação de estruturas mais compactas e cristalinas. Além disso, a análise da pirólise dos quatro aminoácidos revela que maiores frações iniciais de heteroátomos resultam em estruturas grafiticas também com maiores frações dos mesmos, pois esses permanecem nos interstícios e bordas das estruturas em formação e não são eliminados, o que está de acordo com as investigações experimentais. Portanto, verifica-se que a dinâmica molecular reativa é simultaneamente capaz de prever observações experimentais da pirólise desses compostos orgânicos e, também, de explicar os mecanismos fundamentais que regem esse processo físico-químico.