

108

DESENVOLVIMENTO DE CAMPO DE FORÇA PARA O PERFLUOROCICLOBUTANO NO ESTADO LÍQUIDO. *William Kelbert Nitschke, Jones de Andrade, Hubert Karl Stassen (orient.) (UFRGS).*

Os líquidos perfluorados possuem grande interesse científico e tecnológico por serem excelentes solventes para gás carbônico e gás oxigênio, o que lhes confere título de candidatos a sangue artificial e agentes de ventilação líquida. Além disso, os perfluorados estão sendo utilizados como substitutos aos solventes clorados em síntese orgânica, por não apresentarem toxicidade e não afetam a camada de ozônio. Nesse trabalho, utilizou-se a metodologia da simulação computacional por dinâmica molecular, com o objetivo de estabelecer parâmetros dos átomos de flúor para o potencial de Lennard-Jones dentro da metodologia do campo de força AMBER para o perfluorociclobutano, molécula razoavelmente simples, na qual todos os átomos de flúor são equivalentes. Foram utilizadas cargas para os átomos através de cálculos quânticos. Como validação, reproduziu-se densidade e entalpia de evaporação experimentais, com cerca de 3% de erro com relação a dados experimentais, sendo a densidade subestimada e a entalpia de evaporação sobreestimada. As análises de ângulos e comprimentos de ligação concordam com dados experimentais. A análise da estrutura líquida mostrou moléculas razoavelmente esféricas, com estrutura close-packed. (Fapergs).