

VOZES DIVERSAS

DIFERENTES SABERES



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXX SIC

15 A 19
OUTUBRO
CAMPUS DO VALE



DINÂMICA MOLECULAR REATIVA DA PIRÓLISE DE AMINOÁCIDOS SOB ALTA PRESSÃO

Alan Chequim Alonso e André Rodrigues Muniz

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

INTRODUÇÃO



- Cometas podem ter trazido aminoácidos à Terra
- Impacto: P alta + T alta
- O que acontece com os aminoácidos sob estas condições?
- Sobrevivem apenas os encontrados em detritos de pequena dimensão.

Fonte: Yuri_B/Pixabay.

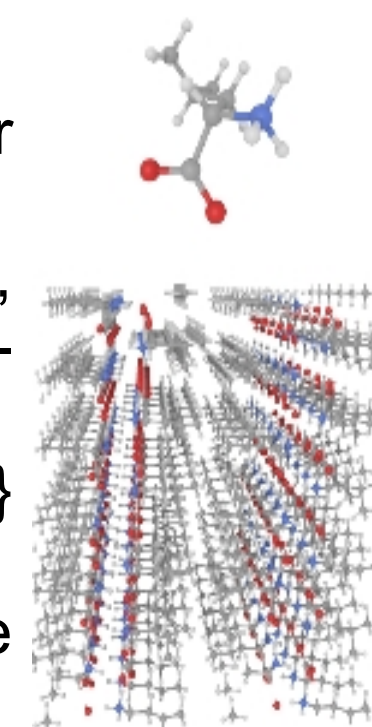
- Estudo experimental (Puerto et al., *J. Anal. Appl. Pyrol.*, v. 126, p. 22-30, 2017; *Mater. Chem. Phys.*, v. 211, p. 107-116, 2018):
- Pirólise de quatro aminoácidos (L-alanina, L-ácido aspártico, L-alanina e α -glicina) sob altas temperaturas (300–1100 °C) e pressões (0, 2,5 e 7,7 GPa)
- Foi observada ampla grafitação das amostras
- Maior cristalinidade observada para L-leucina \Rightarrow Menor fração de heteroátomos e maior pressão

OBJETIVOS

- ✓ Estudo do processamento de aminoácidos sob altas T e P usando simulações de dinâmica molecular reativa
- ✓ Comparar/validar resultados com os experimentos
- ✓ Investigação dos mecanismos de transformação
- ✓ Compreender efeitos da temperatura e da pressão na estrutura final

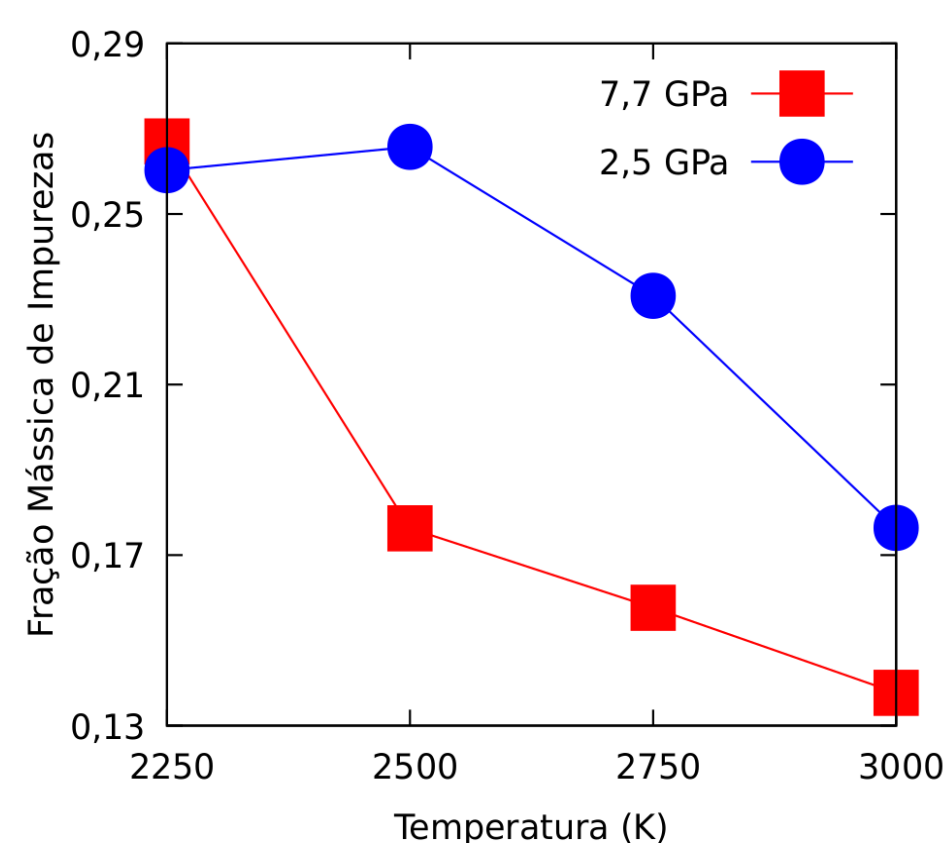
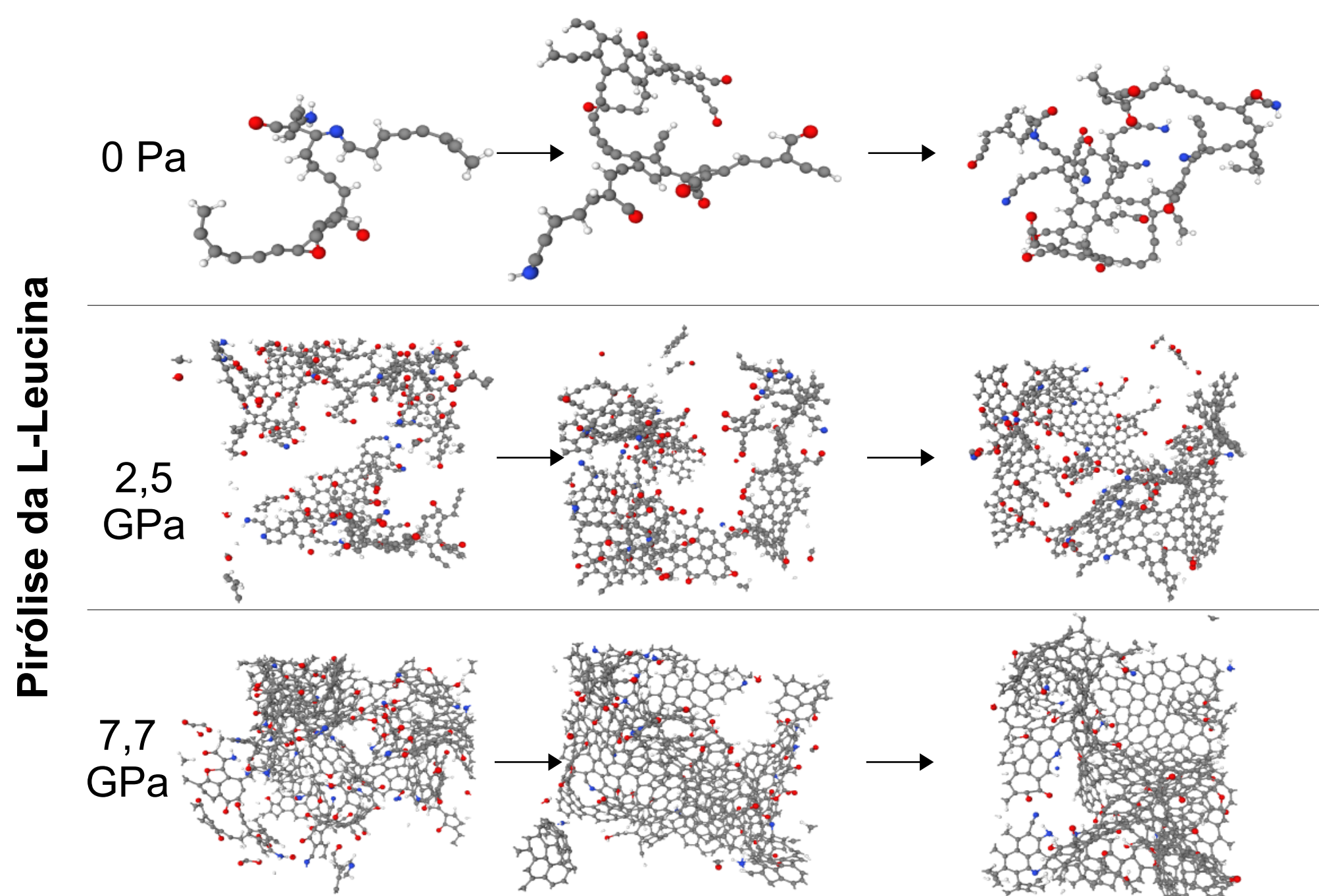
METODOLOGIA

- ReaxFF-Ig \Rightarrow Liu et al., 2011
- Geração de sólidos cristalinos a partir de informações cristalográficas
- Processamento a {2250, 2500, 2750, 3000} K e {0, 2,5, 7,7} GPa para L-leucina
- Processamento a 3000 K e {2,5, 7,7} GPa para os demais
- Timestep: 0,1 fs, barostato e termostato de Nosé-Hoover



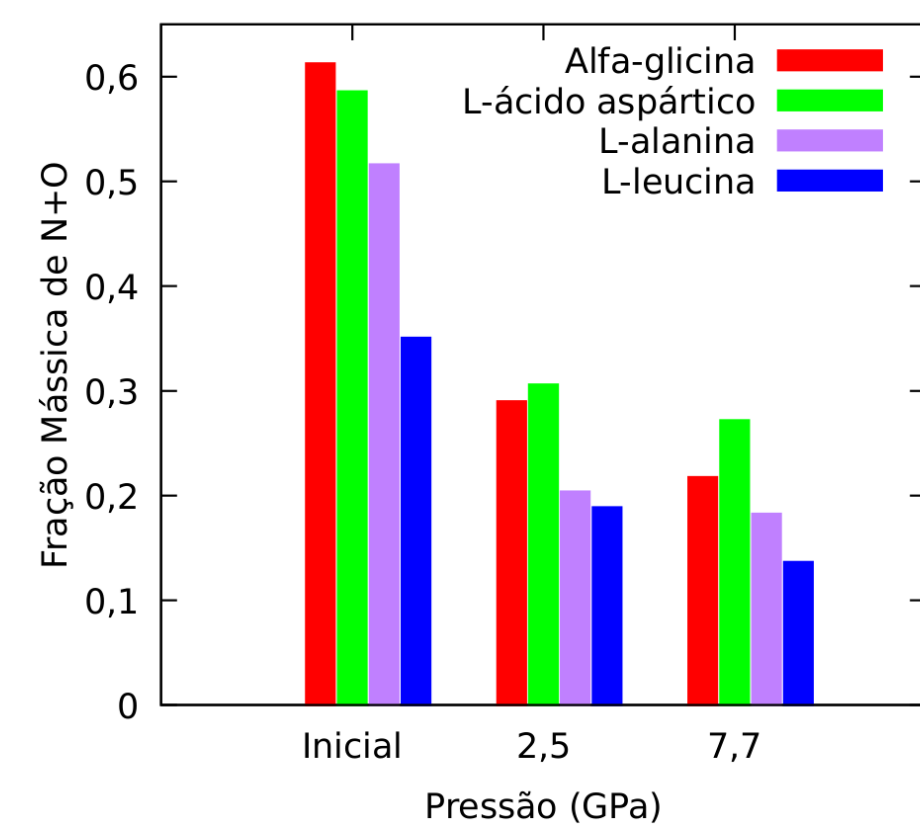
- ### Procedimento
- 1) Minimização de energia, seguido de equilíbrio à T ambiente
 - 2) Elevação P à T ambiente e cte.
 - 3) Elevação T à P cte.

RESULTADOS



L-Leucina:

- Maior temperatura resulta em maior qtd. de eliminações, fornecendo menor presença de impurezas



Aminoácidos:

- Maiores pressões e menores frações iniciais de átomos de N e O favorecem menor presença de impurezas na estrutura final

CONCLUSÃO

- Estruturas de carbono resultantes são contínuas e apresentam domínios amorfos e cristalinos
- Cristalinidade depende fortemente da pressão aplicada: quanto maior a pressão, maior a cristalinidade
- Moléculas gasosas liberadas no processo
- Reações observadas: eliminações, adições e rearranjos

- Excelente concordância entre observações experimentais e as resultantes da simulação
- Maiores detalhes a respeito das transformações envolvidas foi obtido com as simulações, assim como um melhor entendimento da estrutura dos produtos formados e sua relação com as condições de processamento