

089

**ESTUDO DO DMSO NA FASE LÍQUIDA ATRAVÉS DA DINÂMICA MOLECULAR.** *Edson Bernardi e Hubert Stassen,* (Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UFRGS)

Este trabalho tem por objetivo apresentar uma descrição do Dimetilsulfóxido (DMSO) na fase líquida através da simulação de dinâmica molecular. Aplicou-se um modelo de forma a manter a molécula de DMSO rígida constituída por quatro centros de interação, os quais são localizados nos átomos de enxófre, oxigênio e grupos metila. Utilizou-se potenciais de Lennard-Jones para a modelagem das interações do tipo Van der Waals e potenciais Coulombianos para as interações eletrostáticas. O estado termodinâmico escolhido corresponde à temperatura de 298K e ao volume molar de 71,13m<sup>3</sup>/mol. Calculou-se a estrutura deste solvente em termos de funções de distribuição radiais para cada combinação de átomos. Investigou-se as características dinâmicas do DMSO através de funções de correlação temporais para as velocidades lineares e angulares. Integrando estas funções, obteve-se tempos característicos de correlação. Nestas propriedades físicas salienta-se as interações eletrostáticas. (CNPq-PIBIC, PADCT)