

Como se comportam as moléculas quando não estão isoladas?



Simulação da dinâmica molecular da clorofila. Imagem: cedida pelos pesquisadores.

Se a vida às vezes imita a arte, nem sempre o laboratório imita a vida. E isso vale especialmente para a **física molecular**. A transposição de reações e experimentos realizados isoladamente em laboratórios na universidade para um contexto prático pode significar um grande avanço tecnológico em áreas como a produção de energia, por exemplo. Mas no caminho de uma substância do laboratório até a indústria, onde será aplicada em situações diversas, muita coisa precisa ser entendida.

Dentro desse cenário, desde a década de 1990 o Grupo de Física Molecular e Modelagem, do Instituto de Física (IF) da USP, busca comparar a dinâmica de substâncias isoladas com a realidade, estudando o comportamento de moléculas orgânicas em meio líquido.

O objetivo é entender como as propriedades moleculares são afetadas pelo meio através da combinação de simulações computacionais de mecânica estatística e mecânica quântica. As pesquisas permitem facilitar a reprodução das reações em outros materiais e podem vir a ser adaptadas em experimentos e no setor produtivo.

SIMULAÇÃO

A análise do comportamento das moléculas isoladamente é mais simples e fácil de ser realizada. Os processos bioquímicos, porém, costumam ocorrer em meio aquoso - o que interfere na interação das moléculas, pois elas estão se movendo constantemente, e isso não acontece no meio sólido. São diversas conformações distintas que impedem uma descrição do sistema, já que não apresentam um padrão de configuração. É preciso ter uma amostragem de diversas formações que represente a diversidade do líquido.

A dinâmica das moléculas exige uma metodologia de pesquisa mais avançada, que acompanhe sua evolução temporal e as distintas conformações. Para isso, é utilizada uma simulação computacional. O avanço tecnológico das últimas décadas em equipamentos e softwares permitiu a execução de simulações sofisticadas, capazes de fornecer resultados relevantes.

Os algoritmos desenvolvidos pelos pesquisadores do grupo são os recursos para a produção dos softwares. Eles permitem visualizar o comportamento das substâncias orgânicas no meio líquido em

diferentes condições de temperatura e pressão. A estrutura das moléculas é determinada estatisticamente e são comparadas suas propriedades quando estão isoladas. Os dados obtidos viabilizam futuras pesquisas experimentais.

Leia a matéria na íntegra...

[>>A vida secreta das moléculas: como se comportam quando não estão isoladas](#)

Fonte: USP Online Destaque