

DESENVOLVIMENTOS RECENTES DE CAMPOS DE FORÇA POLARIZÁVEIS EM SIMULAÇÕES DE LÍQUIDOS IÔNICOS PRÓTICOS: UMA REVISÃO

Robson Angelo Costa da Silva, Sara Azevedo Aguiar, Rílvia Saraiva de Santiago Aguiar,
Rílvia Saraiva de Santiago Aguiar

Levando em conta o contexto da pandemia de COVID-19 e a impossibilidade de acesso aos laboratórios para a realização das atividades experimentais previstas no projeto inicial, foi necessário reestruturar o projeto. Foi, portanto, realizada uma pesquisa bibliográfica sobre os avanços no desenvolvimento de Campos de Força utilizados em simulações de Dinâmica Molecular de Líquidos Iônicos Próticos (LIPs). Essa revisão tem como objetivo expandir o conhecimento sobre o tema e trará embasamento teórico para realização de trabalhos futuros relacionados. A simulação computacional de LIPs permite a predição das suas propriedades físico-químicas e de seu comportamento em conjunto com outros compostos, permitindo um estudo mais barato dos LIPs. Contudo, a qualidade dos resultados obtidos depende diretamente de quão boa é a representação das interações intra e intermoleculares do sistema feita pelo Campo de Força, o tornando um tema de estudo de grande importância. Neste estudo foram analisados dois dos principais Campos de Força polarizáveis, CL&POL e AMOEBA-IL, com foco na simulação de LIPs. Assim, nesse trabalho foram estudados e compilados diversos artigos internacionais com dados de diferentes sistemas incluindo LIPs nos últimos 10 anos. O Review produzido por esse estudo irá contribuir com a comunidade científica, e está sendo submetido para a publicação em uma revista internacional.

Palavras-chave: Simulação Computacional. Líquidos Iônicos. Dinâmica Molecular. Campos de Força.