

## **Simuladores tentam levar pesquisas do laboratório para a indústria**

### **Física**

Enviado por:

Postado em:06/11/2013

Da Agência USP Se a vida imita a arte, nem sempre a vida copia fielmente o que acontece no laboratório - especialmente no caso da física molecular. A transposição de reações e experimentos realizados isoladamente em laboratório 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. O Grupo de Física Molecular e Modelagem do Instituto de Física da USP busca justamente comparar a dinâmica de substâncias isoladas com a realidade, estudando o comportamento de moléculas orgânicas. O objetivo é entender como as propriedades moleculares são afetadas pelo seu 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 - algo que não acontece no meio sólido. Isso exige estudar a dinâmica das moléculas, acompanhando sua evolução temporal e as distintas conformações que elas assumem. Para isso, os pesquisadores usam simulações computacionais. Os algoritmos desenvolvidos pela equipe brasileira são os recursos fundamentais para a produção de softwares que permitem visualizar o comportamento das substâncias orgânicas no meio líquido em diferentes condições de temperatura e pressão. Os dados obtidos viabilizam futuras pesquisas experimentais e auxiliam no escalonamento dos experimentos para a escala industrial. Simulando a clorofila Os últimos trabalhos da equipe têm sido focados na clorofila, buscando estabelecer parâmetros que ajudem os pesquisadores que estão trabalhando na fotossíntese artificial. "A clorofila," explica o coordenador do grupo, professor Sylvio Canuto, "é um absorvedor muito bom de luz, e há o interesse em produzir materiais que sejam tão eficientes quanto ela. Quando se conseguir fazer isso, será possível resolver o problema da energia." Segundo Canuto, o conhecimento detalhado da clorofila, em seu meio real, poderá contribuir para a produção de células solares e sistemas de geração e armazenamento de energia solar. O foco do grupo, contudo, é a construção de um conhecimento básico que possa ser usado por outros cientistas, como físicos experimentais, por exemplo. Esta notícia foi publicada em 04/11/2013 no site <http://www.inovacaotecnologica.com.br>. Todas as informações são responsabilidade do autor.