

FÍSICO-QUÍMICA

# Desordem simplificada

Equipe de Campinas e do MIT elabora método que facilita o cálculo da entropia



O espalhamento de um líquido: movimento espontâneo

**M**ais do que um conceito obscuro, a desordem é uma quantidade física que pode ser medida, da mesma forma que o comprimento de um lápis. A aparente confusão que acompanha um prosaico café se espalhando na xícara de leite é a chamada entropia, hoje calculada em computador por pelo menos 20 abordagens diferentes. Como essas técnicas são complicadas e trabalhosas, uma equipe da Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) e do Massachusetts Institute of Technology (MIT), nos Estados Unidos, criou um método mais simples que leva aos mesmos resultados: é o Reversible Scaling (RS), que, segundo seus autores, chega a ser 40 vezes mais rápido para calcular a entropia e a energia livre para grandes intervalos de temperatura. Energia livre é a parcela da energia contida em um sistema físico que pode ser convertida em trabalho útil – por exemplo, apenas uma parte da energia química contida em 1 litro de gasolina é transformada em movimento de um automóvel.

“O interesse em calcular a entropia e a energia livre é que elas sempre apontam o caminho pelo qual a natureza se desenvolve espontaneamente”, diz Alex Antonelli, do Instituto de Física da Unicamp, um dos autores do programa, feito em conjunto com seu ex-aluno Maurice de Koning, hoje no MIT, e Sidney Yip, um dos pioneiros na simulação computacional de sistemas físicos, também do MIT. No caso da água virando gelo, a energia livre da água é menor para o estado líquido do que para

o sólido em temperaturas superiores a 0° Celsius. Mas a situação se inverte em temperaturas abaixo desse patamar – essa é a razão pela qual a água congela quando resfriada a zero grau. “O estado de menor energia livre sempre predomina”, diz o pesquisador. É também um delicado balanço da energia interna e da entropia – vale dizer, da energia livre – que determina a estrutura espacial das proteínas de qualquer ser vivo.

**Das células ao calor da Terra** - O método tradicional mais usado, o Interação Termodinâmica, ou TI, exige de cinco a dez simulações em uma dada temperatura para se obter a entropia ou a energia livre nessa dada temperatura. Apoiado pela FAPESP, o recém-criado RS parte de uma temperatura específica, da qual se conhece a energia livre, e a muda de modo dinâmico e lento, com uma só simulação – vem daí o ganho de tempo. “Ninguém pensou antes em adotar essa abordagem porque se achava que não daria certo”, conta Antonelli. Imaginado por Koning, o RS veio

a público em 1999 num artigo na *Physical Review Letters*. Adotado por pesquisadores renomados, como o químico William Reinhardt, da Universidade de Washington, ganhou uma descrição detalhada em dezembro de 2001 no *Journal of Chemical Physics*. Em janeiro, a *Nature Materials* publicou um artigo de três páginas sobre essa nova abordagem, assinado por Yip.

O RS não é um programa de computador, mas um método de domínio público. Por essa razão, lembra Antonelli, cada pesquisador deve adaptá-lo a seus problemas específicos. Por exemplo, um grupo gaúcho está interessado em usar essa abordagem para calcular a energia livre dos íons (partículas atômicas eletricamente carregadas) que atravessam as membranas celulares. O RS pode ser útil também no estudo das propriedades de materiais, quando a simulação é o único caminho. Recentemente, com uma abordagem que, segundo Antonelli, poderia ser feita em um tempo dez vezes menor com o RS, uma equipe inglesa estimou em cerca de 6.500° Celsius a temperatura do ferro líquido no centro da Terra. ●

EDUARDO CESAR

## O PROJETO

Grupo de Propriedades Eletrônicas e Estruturais de Metais e Semicondutores

### MODALIDADE

Linha regular de auxílio à pesquisa

### COORDENADOR

ALEX ANTONELLI – Instituto de Física da Unicamp

### INVESTIMENTO

R\$ 25.599,18 e US\$ 37.482,32