

Estudo por Dinâmica Molecular de PVA em água com variação de parâmetros ambientais

Maíra Theisen (PG), Hubert K. Stassen (PQ), Rosane M. D. Soares (PQ)

Instituto de Química – Grupo de Química Teórica - UFRGS
e-mail: theisen.maira@gmail.com

Palavras-chave: Dinâmica Molecular, PVA, Temperatura.

INTRODUÇÃO

O poli(vinil álcool) (PVA) é um polímero que tem sido bastante estudado para a síntese de hidrogéis. Hidrogéis são redes tridimensionais formadas por cadeias poliméricas hidrofílicas que possuem boa capacidade de reter água.¹ Existe uma classe de hidrogéis que respondem a estímulos do ambiente, são os chamados hidrogéis responsivos. Estes materiais tem sido bastante estudados para aplicações médicas e farmacêuticas.²

PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Inicialmente foram obtidas as cargas atômicas através de cálculos quânticos utilizando a metodologia Merz-Kollman (MK). Estas cargas foram ajustadas com RESP e então utilizadas no campo de força AMBER aplicado nas simulações de Dinâmica Molecular (DM). Foram realizadas mudanças na temperatura do sistema a fim de se estudar o comportamento responsivo do polímero. As análises realizadas foram de Função de Distribuição Radial (RDF), Desvio Quadrático Médio (RMSD) e Raio de Giro (Rg).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O sistema analisado continha o polímero PVA com 42 unidades monoméricas. Primeiramente o sistema foi simulado na temperatura de 298K. Foram feitas simulações a 280K e 310K, partindo-se da configuração já equilibrada do primeiro sistema. A estrutura do polímero foi construída de forma linear, no entanto, ao longo da simulação foi observado que a estrutura se dobra e permanece desta forma até o final da simulação (figura 1).

As ligações de hidrogênio formadas entre os grupos hidroxila do polímero e a água foram fiscalizadas através das análises de RDF

(figura 2). Foram encontradas as distâncias de 0,184 nm para a ligação H(polímero)-O(água) e 0,191 nm para O(polímero)-H(água).

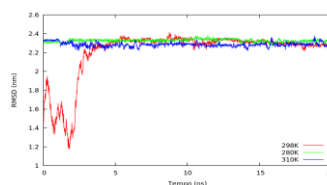


Figura 1. RMSD para o PVA em água a diferentes temperaturas.

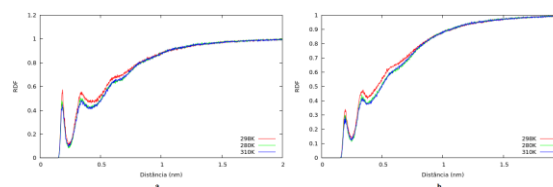


Figura 2. RDF para as três temperaturas: a) H(polímero)-O(água), b) O(polímero)-H(água).

CONCLUSÕES

Conseguiu-se atingir um estado equilibrado para o sistema inicial em poucos ns, e o comportamento foi mantido com a mudança da temperatura. As ligações de hidrogênio não apresentaram mudança significativa com a mudança da temperatura. Os próximos passos seriam o estudo do PVA utilizando o pH como variável e a elaboração do hidrogel de PVA.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio dado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

¹ S. W. Benson and O. Dobis, J. Phys. Chem. A, 102, 5175, (1998).

² T. J. Deming, Prog. Polym. Sci., 32, 858, (2007).