

LABORATÓRIO DE MODELAGEM DE MACROMOLÉCULAS: ESTUDO DA FORMAÇÃO DE MICELAS DE SURFACTANTES

BUENO, Milene¹; DIEHL, Alexandre²

¹Universidade Federal de Pelotas, Licenciatura Plena em Física; ² Universidade Federal de Pelotas, Departamento de Física. milenebueno25@hotmail.com¹, diehl@ufpel.edu.br².

1 INTRODUÇÃO

Atualmente muitas áreas do conhecimento realizam estudos a partir do método de simulações de dinâmica molecular, em especial para o estudo de macromoléculas. O pacote GROMACS faz parte dessa gama de ferramentas computacionais. Assim, o utilizamos para o estudo da micelinização da solução aquosa brometo de cetiltrimetilamônio (CTAB) em água. O CTAB é um tensoativo ou surfactante catiônico constituído de uma cabeça polar (hidrofílica), uma cauda apolar (hidrofóbica) e um contra-íon responsável pelo aumento da hidrofobicidade. Ao adicionar o surfactante à água vemos a formação micelar, esta estrutura corresponde ao contato da parte hidrofílica com a água, e a auto-associação da parte hidrofóbica de modo a minimizar o seu contato com a água. A formação micelar se dá quando temos uma baixa concentração de surfactante formando agregados (micelas), o que denominamos de concentração micelar crítica (CMC).

2 METODOLOGIA (MATERIAL E MÉTODOS)

A metodologia empregada envolveu a utilização de simulação computacional a partir do pacote GROMACS (*Groningen Machine for Chemical Simulation*), desenvolvido pela Universidade de Groningen, Holanda. De forma geral, este pacote de distribuição livre realiza a simulação em nível microscópico, usando dinâmica molecular. Os constituintes são representados de forma explícita, identificando os tamanhos, interações e ligações a partir de campos de força. A dinâmica a nível microscópico é resolvida a partir da solução das equações de movimento de Newton, com a conformação de equilíbrio interpretada a partir das configurações geradas, energias finais, propriedades termodinâmicas, etc.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, apresentamos a análise de informações de um grupo pequeno de surfactantes, já que ainda não foram realizadas todas as simulações e análises de forma crescente de surfactantes até a formação micelar. Isto se deve a necessidade de um grande tempo computacional para realizarmos cada uma das simulações.

O valor da CMC é determinado pelo balanço entre as forças de repulsão entre as partes polares e as forças de atração entre as partes hidrofóbicas. Este valor é reduzido quando a repulsão entre as partes polares é diminuída. Esta constatação pode ser verificada na fig. 1, onde temos as interações das forças de

Coulomb. No entanto, na fig. 2 temos as interações de Lennard-Jones ou interações de curto alcance, que apresentam-se estáveis para os sistemas com quatro e oito surfactantes como o esperado, já que as moléculas de água tendem a se organizar dentro da caixa de simulação conforme aumenta-se a quantidade de surfactantes no sistema.

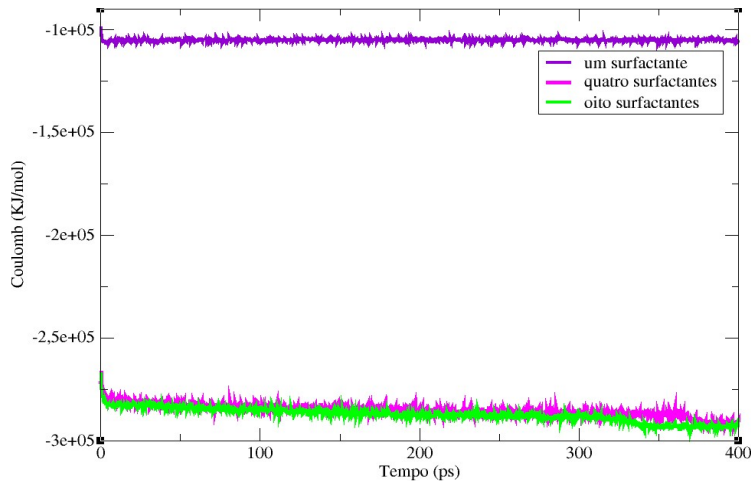


Figura 1 – Gráfico do tempo em relação a forças de Coulomb.

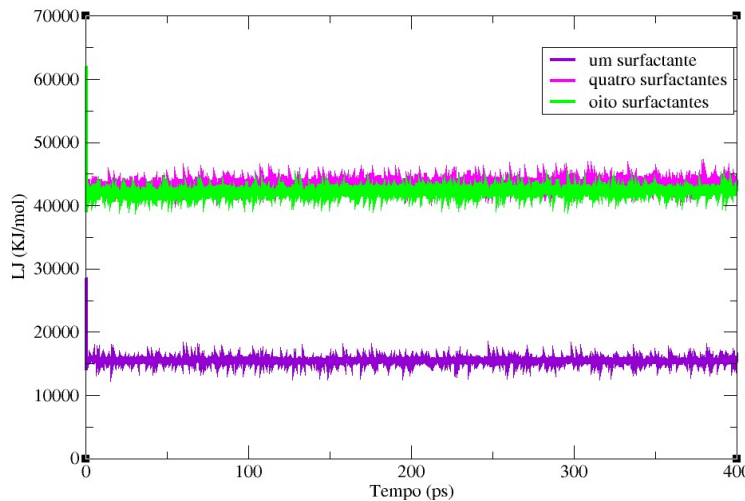


Figura 2 – Gráfico do tempo em relação a forças de Lennard-Jones.

De forma ilustrativa temos a fig. 3 com as visualização da simulação dos oito surfactantes, onde acontece uma aproximação considerável entres os mesmos. Atribuímos isto a uma possível evidência de formação micelar. Os oito surfactantes encontram-se em uma caixa cúbica com dimensões de 729 nm^3 e 5992 moléculas de água (as moléculas de água encontram-se desativadas na visualização) a uma temperatura ambiente de 300 K. A simulação foi gerada em um tempo de 400 ps. Precisaríamos de tempos mais longos de simulação para verificar a formação

completo das micelas, o que está além da nossa capacidade atual de computação.

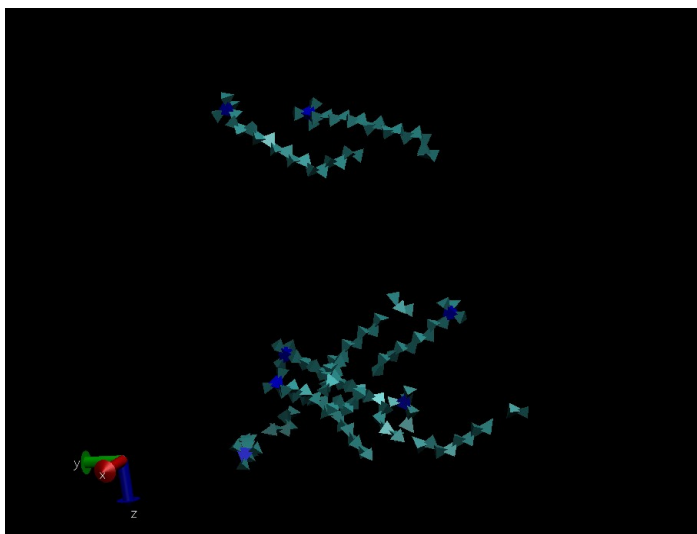


Figura 3 – Surfactantes em formação micelar.

Uma alternativa para evitar os altos tempos de computação necessários para a obtenção da formação micelar, seria iniciar a simulação com uma estrutura micelar já formada, para então analisar a sua estabilidade. Isto foi feito usando o programa PACKMOL, onde o complexo formado por 16 moléculas de surfactantes são arranjadas de forma artificial numa estrutura esférica, como pode ser visto na fig. 4. Com isto, a abordagem anterior, onde as diferentes moléculas de surfactante eram distribuídas na caixa de simulação e a dinâmica molecular via GROMACS se encarregava de formar os complexos, deve ser abandonada. Uma vez formada a micela via PACKMOL, dinâmica molecular usando GROMACS será realizada a fim de verificar se a estrutura é estável ou não, frente às interações com as moléculas de água. Esta etapa está em desenvolvimento.

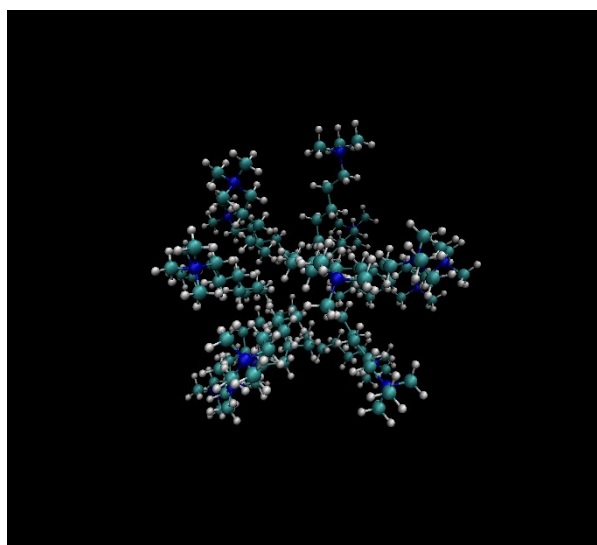


Figura 4 – Formação micelar em processo de estabilização.

4 CONCLUSÃO

Após realizarmos algumas das simulações necessárias para a formação micelar, observamos que o pacote GROMACS reproduziu resultados com uma razoável precisão. Pretendemos concluir esta etapa com a estabilização do sistema para analisar a formação micelar, referente as variações de energia livre, entropia e entalpia e comparar dados com a literatura.

5 REFERÊNCIAS

VAN DER SPOEL, David; LINDAHL, Erik; HESS, Berk; KUTZNER, Carsten; VAN BUUREN, Aldert R.; APOL, Emile; MEULENHOF, Pieter J.; TIELEMAN, D. Peter; SIJBERS, Alfons L.T.M.; FREENSTRA, K. Anton; VAN DRUNEN, Rudi; BERENDSEN, Herman J.C. **Gromacs User Manual, Version 4.5.4**, disponível na página www.gromacs.org.

BASITO, Reinaldo C. **Novos tensoativos derivados da 2-D-Glucosamina**. São Paulo, 2001. Tese Doutorado – Universidade de São Paulo, São Paulo, 13/12/2001.

GOMES, Fabiano E.S. **Obtenção de sistemas microemulsionados e estudo de simulação por dinâmica molecular de sistemas micelares objetivando a veiculação de produtos naturais bioativos**. Natal, 2010. Tese Doutorado- Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 30/03/2010.

PACKMOL, *Packing Optimization for Molecular Dynamics Simulations*, Universidade Estadual de Campinas.