



Realização:



Apoio:



XVII CIC
X ENPOS

Conhecimento sem fronteiras
XVII Congresso de Iniciação Científica
X Encontro de Pós-Graduação
11, 12, 13 e 14 de novembro de 2008

Teoria e simulação de eletrólitos e polieletrólitos

Autor(es): VELASQUE, Luciana Araújo; DIEHL, Alexandre

Apresentador: Luciana Araújo Velasque

Orientador: Alexandre Diehl

Revisor 1: Paulo Sérgio Kuhn

Revisor 2: Emerson Gustavo de Souza Luna

Instituição: Universidade Federal de Pelotas

Resumo:

Misturas de eletrólitos carregados, polímeros e outros tipos de macromoléculas são de grande interesse para a indústria. Um exemplo típico é uma solução contendo moléculas de DNA, sais e surfactantes. Para o caso com surfactantes, sabe-se que para algumas concentrações de surfactantes ocorre a formação de complexos com os polieletrólitos, como por exemplo o DNA. Estes complexos são importantes no chamado tratamento genético, onde genes compostos de vários nucleotídeos são introduzidos no interior de uma célula. O problema é que as membranas celulares são compostas de fosfolípidos que, em solução aquosa, ficam ionizados, adquirindo uma carga de mesmo sinal que o fragmento de DNA. Com isto, a repulsão eletrostática entre as cargas da membrana e do DNA evita a penetração dos polinucleotídeos dentro da célula. A formação destes complexos com surfactantes, ou sais, permite que a carga do polieletrólito seja redefinida, tal que a interação com a membrana possa se tornar atrativa, facilitando a entrada do DNA na célula. O objetivo deste projeto é estudar teoricamente a formação de complexos carregados, formados por uma dada concentração de polieletrólitos flexíveis, em solução contendo sal monovalente. Foi estudada a conformação dos polieletrólitos em solução, para diferentes tamanhos das cadeias e temperaturas, observando a influência da concentração de contraíons como também de sais presentes na solução. A metodologia utilizada baseou-se na construção da energia livre total, reunindo as diferentes contribuições microscópicas à termodinâmica do sistema: uma energia elástica, um termo de volume excluído, uma energia eletrostática e um termo entrópico. Feito isto, minimizamos a energia livre total, uma vez que a conformação de equilíbrio dos polieletrólitos é dada pela energia livre total mínima. Isto é feito através da análise da energia livre total em função de dois parâmetros: a fração de contraíons condensados sobre o polieletrólito e a extensão do complexo. Os resultados são comparados com dados experimentais e resultados teóricos prévios, a fim de sugerir futuras extensões ao modelo.