



E310

**PROPRIEDADES DE HIDRATAÇÃO DE SURFACTANTES UTILIZADOS NA SÍNTESE DE FOSFATOS DE CÁLCIO NANOPARTICULADOS. SIMULAÇÕES POR DINÂMICA MOLECULAR**

Bárbara Pereira Carlos (Bolsista SAE/PRG) e Prof. Dr. Munir Salomão Skaf (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Moléculas tensoativas além de possuírem uma grande importância tecnológica, desempenham um papel central em vários fenômenos cientificamente relevante, como a formação de microemulsões ou de membranas biológicas, por exemplo. Este projeto teve o seu desenvolvimento visando o estudo de propriedades gerais de solvatação de polioxietileno em água através de métodos mecânico-estatístico de Dinâmica Molecular (MD). O estudo de Dinâmica Molecular foi realizado com o sistema PEO/H<sub>2</sub>O com o objetivo de investigar propriedades de ligações de hidrogênio entre os co-solventes em função da temperatura e composição. Este método consiste em gerar um grande número de configurações moleculares no espaço de fase do sistema, resolvendo-se as equações de movimento Newtonianas para cada partícula da caixa de simulação durante intervalos consecutivos de tempo. Resultados da literatura indicam que a estrutura conformacional do PEO em solução aquosa é helicoidal com moléculas de água presas aa estrutura do polímero. Neste trabalho, simulações de MD foram realizadas visando confirmar esta característica estrutural.

PEO - Dinâmica Molecular - Estudo Conformacional