



E438

CONFORMAÇÃO DE POLÍMEROS POR SIMULAÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR

Daniel José Guimarães Prates (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Munir S. Skaf (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Experimentos em computador (simulações) ocupam, atualmente, um lugar de grande importância nas pesquisas científicas. Na simulação, o modelo provém da teoria, mas os cálculos são realizados em um computador através de algoritmos implementados numa dada linguagem de programação. Através de técnicas de simulação por Dinâmica Molecular (DM) foram estudados os movimentos característicos das cadeias poliméricas (esqueleto e cadeias laterais) dos polímeros não-conjugados (PVA e PVAc). Para tal estudo foi realizada uma análise com relação à evolução temporal de um ângulo diedro $\varphi(t)$, uma análise temporal da distorção da cadeia principal (espinha, backbone), bem como a variação do vetor posição entre os extremos da cadeia. Através dessas análises determinamos propriedades microscópicas destes sistemas poliméricos.

Polímeros não conjugados (PVA e PVAc) - Simulação - Dinâmica molecular