**Parametrização de Fragmentos do poli(etileno tereftalato) Para Estudo Por Dinamica Molecular**

**Fabricio Uliana1, Eloi Alves da Silva Filho1, Arlan da Silva Gonçalves1,2, Vadilson Malaquias dos Santos1**

**1Universidade Federal do Espírito Santo**

**2Instituto Federal do Espírito Santo**

fabriciouliana@outlook.com

RESUMO:

A modelagem molecular consiste em um grupo de métodos teóricos e computacionais que tem por objetivo tentar reproduzir o comportamento molecular. Dessa forma, é possível prever uma série de fenômenos e propriedades de uma molécula ou um sistema mais complexo envolvendo centenas ou até milhares de átomos. Dentre os vários métodos, a dinâmica molecular é uma ferramenta amplamente utilizada para estudos de sistema contendo macromoléculas de interesse biológicos como proteínas sendo capaz de prever, dentre outras propriedades, se uma molécula possui atividade biológica. No que diz respeito ao estudo de polímeros, a utilização de técnicas de modelagem molecular ainda não é uma prática muito difundida e alguns obstáculos devem ser ultrapassados, contudo trabalhos já foram realizados e obtiveram bons resultados[1]. Nesse trabalho a molécula de poli(etileno tereftalato) (PET) foi parametrizada no campo de forças OPLS-AA para realização de estudos de dinâmica molecular. O processo de parametrização consiste em classificar adequadamente cada átomo que compõem a molécula do polímero de acordo com as opções disponíveis no campo de forças. Isso é um ponto crucial do processo visto que cada tipo de átomo possui parâmetros característicos como comprimento de ligação, ângulos e diedros. Foram parametrizados fragmentos de moléculas de PET de diferentes tamanhos. Os fragmentos criados foram submetidos a simulação de dinâmica molecular em caixa com água e variação da temperatura. Os resultados de interação polímero-polímero apresentam variações no padrão possibilitando a identificação da temperatura de transição vítrea (tg). Esses resultados indicam que o modelo criado é adequado e pode ser usado para obter mais informações sobre o PET além de indicar que o campo de forças OPLS-AA é uma boa opção para estudo desse material.

**Palavras- chave**: Modelagem Molecular*; PET; Parametrização.*

REFERÊNCIAS:

[1] K. K. Bejagam, C. N. Iverson, B. L. Marrone, and G. Pilania, “Molecular dynamics simulations for glass polyhydroxyalkanoate biopolymers †,” pp. 17880–17889, 2020.