

Soluções aquosas e géis de colágeno são sistemas de grande interesse na ciência dos materiais e na medicina. Devido à complexidade destes sistemas, são necessários estudos com sistemas modelo, como por exemplo, a solução aquosa de (L-Proilil-L-Proililglicil)_n (PPG5), estrutura que mimetiza similares biológicos. A dinâmica molecular, através do cálculo do movimento e da energia das moléculas em nível atômico do colágeno modelo, permite auxiliar na interpretação de experiências e abordagens teóricas. As simulações são baseadas em algumas suposições teóricas e simplificações, que dependem das propriedades de interesse. No nosso trabalho, realizamos simulações de dinâmica molecular com o pacote GROMACS, onde o colágeno modelo, na forma de uma hélice tripla, encontra-se completamente cercado por moléculas de água em uma célula unitária, onde condições periódicas são aplicadas. O sistema foi submetido a um protocolo de simulação com aquecimento e resfriamento, em taxas variadas. As simulações mostraram desnaturação da estrutura ao longo da rampa de aquecimento, com mudança brusca a 370K, havendo um enovelamento irreversível das fitas helicoidais e uma diminuição monotônica do número de ligações de hidrogênio polímero-água. O comportamento de hidratação, porém, foi não monotônico, com recuperação parcial do número de moléculas de água de hidratação. A estruturação da água, monitorada também através da função de distribuição radial entre átomos polares do polímero e água, mostra, portanto reversibilidade, uma vez que o aumento de temperatura implica perda de água de hidratação e o resfriamento mostra uma recuperação (ainda que parcial) destas águas. Este efeito, porém, age de modo mais pronunciado na segunda esfera de coordenação.