

Poli(N-isopropilacrilamida) (PNIPAm) é um polímero termossensível que apresenta uma temperatura crítica inferior de solubilidade em torno de 32°C. Em temperaturas abaixo de 32°C, o polímero encontra-se em um estado bastante hidrofílico, apresentando elevada interação com moléculas de água e elevado grau de hidratação. Acima de 32°C, ocorrem alterações bastante significativas na sua estrutura, devido à mudança de um estado hidrofílico para um estado hidrofóbico, que leva o polímero a um estado de desidratação e diminuição de volume. Esse comportamento tem despertado o interesse para possíveis aplicações biológicas do PNIPAm, entre as quais se destaca a sua utilização como um possível transportador de fármacos.

Com o objetivo de entender os efeitos e as diferentes interações que ocorrem com o PNIPAm na temperatura de 32°C e que levam ao comportamento descrito, simulações computacionais de dinâmica molecular foram realizadas a fim de investigar o comportamento a nível atômico molecular em diferentes sistemas envolvendo PNIPAm.

No presente trabalho foi investigado um sistema contendo um oligômero de N-isopropilacrilamida com 8 unidades monoméricas (NIPA8) e um segundo sistema com um oligômero de 32 unidades (NIPA32) está sendo estudado. Para a realização das simulações foi utilizado o pacote GROMACS. Para a construção dos sistemas, a estrutura de partida do oligômero a ser utilizado foi gerada e colocada em uma caixa cúbica com condições periódicas de contorno e, em seguida foram adicionadas moléculas de água e realizada uma minimização da energia do sistema. Finalizada essa primeira etapa, comum a ambos sistemas, o NIPA8 foi submetido à uma rampa de aquecimento-resfriamento de 270 a 320K, sendo simulados 20ns por temperatura, equivalendo a um total de 230ns de simulação. O NIPA32 também está sendo submetido a uma rampa de aquecimento-resfriamento, passando pelas temperaturas de 270, 280, 300, 305, 310, 330K, num total de 100ns de simulação para cada temperatura. Para ambos os sistemas foi utilizado *ensemble* NPT. Ao final das simulações do NIPA8, foram realizados cálculos de deslocamento quadrático médio (RMSD), raio de giro, funções de distribuição radial (RDF), análise de ligações de hidrogênio a partir das trajetórias obtidas durante as simulações. A análise dos resultados para o sistema NIPA8 mostrou que esse sistema é totalmente independente da temperatura e nenhuma alteração significativa em termos da estrutura do oligômero e distribuição de moléculas de água foi observada, dando indícios de que os efeitos que levam as mudanças estruturais observadas a 32°C são dependentes de um maior tamanho de cadeia ou de possíveis interações entre diferentes cadeias poliméricas.