

Simulação molecular da formação de filmes multicamadas: influência da densidade de carga e comprimento dos polieletrólitos.

Gabriel L. Assis (IC), Tiago D. Martins (PG), Marisa M. Beppu (PQ).

Resumo

A formação de filmes por *Layer by Layer* (LbL) é prática e versátil, e consiste na adsorção sequencial de polieletrólitos de cargas opostas em um substrato carregado. O objetivo central deste trabalho foi avaliar, por meio da simulação molecular, a influência da carga dos polieletrólitos na formação de filmes multicamadas, que possui, experimentalmente, relação direta com o pH do meio. Adotou-se um planejamento fatorial 2^{4-1} , com ponto central, e os parâmetros da simulação são os mesmos utilizados no trabalho de Abu-Sharkh (2006). Ademais, foram estudados o número de moléculas adsorvidas por camada, a espessura do filme e a distribuição das espécies em função desta.

Palavras Chave: Layer by Layer, simulação molecular, nanofilmes.

Introdução

A técnica para construção de filmes multicamadas de polieletrólitos foi proposta por Decher (1) na década de 90. Apesar da existência de diversos trabalhos experimentais (2, 3), a área carece de pesquisas para elucidar questões relativas a aspectos moleculares, como interpenetração entre camadas, estabilidade do filme e interações moleculares, colocando a perspectiva da simulação molecular em papel de destaque.

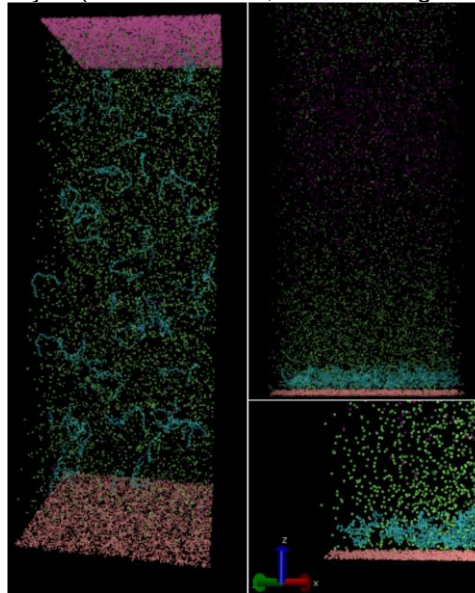
Abu-Sharkh (4, 5) realizou simulações com cadeia de até 128 monômeros e densidade de carga variando entre 0,5 e 1. Entretanto, um tópico ainda não abordado é a assimetria de densidade de cargas e do comprimento da cadeia dos polieletrólitos. O presente trabalho aborda tais questões e amplia as faixas das variáveis estudadas: o comprimento das cadeias varia entre 32 e 256 monômeros, enquanto a densidade de carga está entre 0,125 e 1.

Resultados e Discussão

Os resultados para a presente pesquisa ainda estão em processo de obtenção. Acerca da metodologia experimental, ressalta-se que o tempo médio para a deposição de uma camada torna possível a construção dos filmes propostos com os recursos computacionais disponíveis.

É importante ressaltar que se comprovou a aplicação dos parâmetros de interação adotados por Abu-Sharkh (5) para moléculas com o dobro do número de monômeros daquelas usadas em seu trabalho, permitindo simulações mais fidedignas a realidade.

Figura 1. Sistema antes e depois da primeira deposição (32 monômeros, 100% carregado).



Conclusões

As informações obtidas melhoram o entendimento da formação dos nanofilmes, ajudando a controlar a abordagem “bottom-up” do LbL.

Agradecimentos

Agradeço à Unicamp, à FEQ, e a todos que me orientaram ao longo deste projeto.

1. Decher G, Hong JD, Schmitt J. *Thin Solid Films*. 1992;210-211, Part 2(0):831-5.
2. Picart C, Gergely C, Arntz Y, Voegel J-C, Schaaf P, Cuisinier FJG, et al. *Biosensors and Bioelectronics*. 2004;20(3):553-61.
3. Decher G. *Science*. 1997;277(5330):1232-7.
4. Abu-Sharkh B. *Journal of Chemical Physics*. 2005;123(11).
5. Abu-Sharkh BF. *Polymer*. 2006;47(10):3674-80.