

Estudo da propriedade *anti-incrustante* de monocamadas auto organizadas por microbalança à cristal de quartzo e dinâmica molecular

Melany Isabel Garcia Nicholson (IC)¹; Adriano dos Santos¹ (PG); Gustavo Troiano Feliciano¹ (PQ); Paulo Roberto Bueno (PQ)^{1*}.

¹Universidade Júlio de Mesquita Filho – UNESP – IQAr.

Endereço: Rua Prof. Francisco Degni, 55, Quitandinha – 14800-060 – Araraquara, SP.

Departamento de Físico-Química; e-mail: prbueno@iq.unesp.br

Palavras Chave: superfícies *anti-incrustantes*, monocamadas auto organizadas, QCM, dinâmica molecular.

Abstract

Study of the low-fouling property of self-assembled monolayers using quartz crystal microbalance and molecular dynamics.

Results from QCM proved the low-fouling property in PEG-thiol. MD was then used to understand those results better.

Introdução

O PEG-thiol (HS-(CH₂)₁₁-(EG)₃-OCH₂-COOH ou também conhecido como ácido 2-(2-[2-(11-mercapto-undeciloxi)-etoxi]-etoxi)-etoxi-acético) é amplamente relatado na literatura como possuidor de ação *anti-incrustante* quando formado sobre superfícies metálicas.

Foi um dos primeiros materiais a ser relatado com essa propriedade, à qual é de grande interesse na construção de superfícies sensoras e biosensoras, por permitir ampliar a seletividade dos sinais transdutores associados ao sensoriamento.

O objetivo desse trabalho é estudar essa propriedade tanto por microbalança à cristal de quartzo (QCM) como também por simulações por dinâmica molecular (MD).

Resultados e Discussão

Os resultados obtidos por QCM são mostrados na Figura 1, abaixo, para uma superfície metálica de ouro e para a mesma superfície após a formação de uma monocamada auto organizada de PEG.

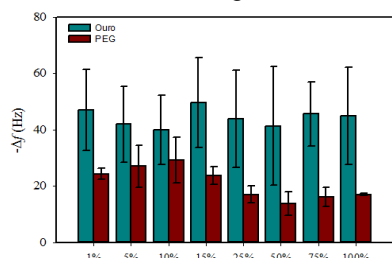


Figura 1. Terceiro harmônico da QCM (Q-SENSE); porcentagens de soro diluído em PBS (v/v).

A partir de testes estatísticos verificou-se que as médias dos dois conjuntos são diferentes, sendo que a média das medidas do PEG-thiol imobilizado sobre a superfície do ouro é menor que a média das

medidas apenas em superfície de ouro, confirmando a propriedade do *anti-incrustante* do PEG-thiol.

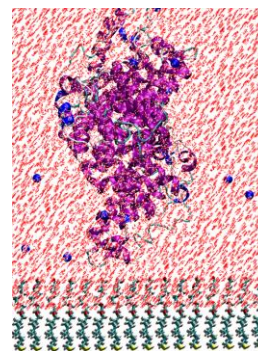


Figura 2. Ilustração do sistema estudado por dinâmica molecular: soroalbumina sobre a superfície de PEG-thiol em água.

Os resultados preliminares obtidos por dinâmica molecular, em termos estruturais e energéticos, mostram (Figura 2) que há interações importantes na interface água-monocamada, e que são sensíveis à espécie adsorvida, o que determinará o caráter *anti-incrustante* da camada.

Conclusões

Pelas medidas realizadas em QCM pode-se concluir que o PEG-thiol possui propriedade *anti-incrustante* quando comparada a superfície de ouro e, pelas simulações realizadas até o momento, vê-se que os resultados convergem com os obtidos por QCM.

Agradecimentos

Agrademos a apoio financeiro da PROPe e da FAPESP (processo 2015/15695-0) pela bolsa de iniciação científica concedida à M.I.G.N. para a realização deste estudo.

¹ RAGHUPATHI, L. A. *Strategies for creating antifouling surfaces using self-assembled poly(ethylene glycol) thiol molecules*. 2011. 149 f. Tese (Doutorado) – Aarhus University, Denmark. 2011.

² Zheng, J. et al. Strong Repulsive Forces between Protein and Oligo (Ethylene Glycol) Self-Assembled Monolayers: A Molecular Simulation Study. *Biophysical Journal*. Vol. 89. July 2005. p. 158-166.

³ Chen, S. et al. *Polymer* 51/ (2010) 5283-5293.