




C A P Í T U L O 1

QUÍMICA COMPUTACIONAL E ESTUDO DE COMPOSTOS POLIMÉRICOS

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.994112616041>

Fabício Uliana

Vadilson Malaquias dos Santos

Rayanne Penha Wandenkolken Lima

Eloi Alves da Silva Filho.

INTRODUÇÃO

Os polímeros desempenham um papel central na sociedade moderna. Do ponto de vista químico, são substâncias de cadeia longa compostas por unidades estruturais menores que se repetem. Essas macromoléculas possuem propriedades físicas e químicas únicas, decorrentes, em grande parte, das interações intramoleculares e intermoleculares presentes. Sua relevância está associada a uma ampla variedade de aplicações em setores como medicina, indústria automotiva, eletrônica, embalagens e construção civil, entre muitos outros.

Os compostos poliméricos são estudados em diversas áreas. Na medicina, os polímeros têm sido utilizados na fabricação de dispositivos biomédicos. Materiais poliméricos com características como biocompatibilidade e mecanismos de degradação controlada permitem a produção de próteses, implantes e sistemas personalizados de liberação de medicamentos, ajustados às necessidades dos pacientes. A pesquisa em polímeros biomédicos tem se concentrado no desenvolvimento de materiais que imitam as propriedades da matriz extracelular, promovendo a adesão celular e facilitando a regeneração de tecidos [1].

Na indústria automotiva, a química dos polímeros é explorada na criação de materiais leves e resistentes. A incorporação de reforços fibrosos, como fibras de carbono, e a utilização de compósitos poliméricos proporcionam uma combinação

adequada de propriedades mecânicas, como alta resistência à tração e rigidez. Esses materiais oferecem vantagens significativas em relação aos materiais tradicionais, como aço e alumínio, contribuindo para a redução de peso, o aumento da eficiência energética e a diminuição do impacto ambiental. Além disso, a utilização de polímeros termoplásticos na fabricação de componentes automotivos permite maior liberdade de design, otimizando a funcionalidade e a estética dos veículos [2].

Na eletrônica, o estudo dos polímeros desempenha papel crucial, principalmente no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos flexíveis. Polímeros condutores, como o poli(3,4-etilenodioxitiofeno):poli(estireno sulfonato) (PEDOT:PSS), são utilizados como materiais de revestimento condutor em circuitos impressos flexíveis. Esses materiais apresentam alta flexibilidade e, na presença de dopantes, tornam-se bons condutores, permitindo a fabricação de dispositivos eletrônicos mais leves, portáteis e até mesmo vestíveis. Além disso, a pesquisa em polímeros semicondutores tem como objetivo desenvolver materiais com propriedades eletrônicas adequadas para aplicações em células solares, transistores orgânicos e displays flexíveis, entre várias outras possibilidades [3].

Na área de embalagens, a química dos polímeros é empregada para criar materiais com propriedades de barreira adequadas. Polímeros como o polietileno de baixa densidade (PEBD) e o polipropileno (PP) são amplamente utilizados devido às suas excelentes propriedades de barreira ao oxigênio e à umidade. O polietileno tereftalato (PET) também é amplamente utilizado nesse setor, sendo o principal material empregado na produção de embalagens para bebidas carbonatadas. A pesquisa em embalagens sustentáveis tem buscado o desenvolvimento de polímeros biodegradáveis e a implementação de estratégias eficientes de reciclagem, visando reduzir o impacto ambiental gerado pelo descarte desses materiais no pós-consumo [4].

Na construção civil, a utilização de polímeros modificados como aditivos em concretos e argamassas melhora suas propriedades mecânicas. Compostos poliméricos também são utilizados como agentes impermeabilizantes em estruturas. Além disso, polímeros como o poliestireno expandido (EPS) são amplamente empregados no isolamento térmico e acústico de edificações. Existem, ainda, estudos voltados ao desenvolvimento de soluções como a incorporação de materiais poliméricos oriundos de descarte em agregados para concreto, mantendo as características mecânicas e reduzindo o peso final da estrutura [5].

Estudos voltados à conversão e ao armazenamento de energia também estão em foco. A utilização de polímeros para armazenamento de energia envolve o desenvolvimento de materiais condutores e semicondutores, utilizados, por exemplo, na produção de baterias recarregáveis com maior durabilidade e menor custo. Além disso, a pesquisa em células solares orgânicas baseadas em polímeros tem ganhado cada vez mais espaço, e os resultados são promissores [6].

Os polímeros também são amplamente utilizados no meio agrícola. Dentre as várias aplicações, destaca-se a produção de filmes plásticos utilizados, por exemplo, na cobertura de estufas empregadas no cultivo e beneficiamento de diversos produtos. Esses filmes normalmente são produzidos a partir de polímeros como o polietileno de baixa densidade (PEBD) e o polietileno de alta densidade (PEAD), que oferecem transparência, resistência mecânica e proteção contra raios UV. Além disso, alguns filmes poliméricos podem ser utilizados como cobertura morta, com o intuito de preservar a umidade do solo e prevenir o crescimento de ervas daninhas [7].

De maneira geral, os polímeros ganharam notoriedade devido às suas características físicas e químicas. Dessa forma, grande parte dos estudos recentes relacionados a esses materiais busca entender, explicar, desenvolver e aprimorar tais propriedades. Para isso, podem ser empregadas abordagens experimentais, por meio do uso de materiais e equipamentos adequados para a obtenção de dados em laboratório, ou ainda abordagens computacionais, que modelam in silico o sistema de interesse e obtêm dados por meio de cálculos computacionais.

A modelagem molecular é uma ferramenta poderosa que permite obter uma compreensão mais profunda da estrutura, das propriedades e do comportamento de moléculas simples e de macromoléculas complexas. Os métodos computacionais vêm sendo utilizados com sucesso em sistemas biológicos há bastante tempo e apresentam boa precisão na obtenção de dados acerca de um sistema. Um exemplo é o trabalho de [8], que resume as aplicações de vários métodos de modelagem molecular no estudo de estrogênios e xenoestrogênios.

Outros estudos frequentemente relatados estão relacionados ao planejamento e ao projeto de novas moléculas com atividade inibitória sobre diversas enzimas, bem como de moléculas capazes de interagir com proteínas, podendo ser utilizadas no tratamento de diferentes doenças. Um exemplo recente foi a utilização de métodos computacionais na tentativa de encontrar ou planejar moléculas ativas para o tratamento da síndrome respiratória aguda grave causada pelo SARS-CoV-2, que gerou um surto considerado oficialmente uma pandemia pela Organização Mundial da Saúde (OMS) em março de 2020 [9].

No desenvolvimento de células fotovoltaicas orgânicas, a química computacional também desempenha papel de grande importância. Métodos como a teoria do funcional da densidade (DFT), a DFT dependente do tempo (TD-DFT) e até mesmo a dinâmica molecular (DM) são capazes de fornecer uma série de dados relevantes para o entendimento e o desenvolvimento desses materiais [10].

A química computacional também vem auxiliando na descoberta e na compreensão de novos materiais capazes de atuar como fotocatalisadores orgânicos, que podem ser utilizados para diversas finalidades, como, por exemplo, a síntese de combustíveis renováveis, conforme discutido por [11].

O estudo de materiais poliméricos também é amplamente beneficiado pelo uso de métodos computacionais. Vários aspectos podem ser analisados, desde a síntese até a degradação dessas substâncias. Trabalhos relacionados a processos de degradação de polímeros naturais e sintéticos pela ação de metaloenzimas são apresentados por [12] e indicam a importância dos métodos computacionais na obtenção de dados e no entendimento do processo.

Propriedades físicas e químicas de polímeros podem ser obtidas por meio de métodos computacionais, sejam eles clássicos ou quânticos. Uma grande variedade de métodos está disponível, e cada um pode fornecer informações relevantes sobre diferentes aspectos dos materiais poliméricos. Por exemplo, métodos clássicos, como a dinâmica molecular, permitem simular o comportamento dos polímeros em diferentes condições de temperatura e pressão, fornecendo informações sobre estabilidade estrutural, propriedades mecânicas e difusão molecular.

Por outro lado, métodos quânticos, como a teoria do funcional da densidade (DFT), podem ser utilizados para investigar propriedades eletrônicas, energéticas e a reatividade química dos polímeros em nível molecular. Essas abordagens computacionais permitem estudar a interação entre os átomos constituintes do polímero, compreender as ligações químicas e prever propriedades como energia de ligação, espectros vibracionais e polarizabilidade.

O uso de modelagem teórica e de métodos de simulação, como a dinâmica molecular, tem permitido análises mais precisas da conformação das cadeias, das interações poliméricas e da resposta a diferentes estímulos físico-químicos. Por meio desses métodos, é possível prever o raio de giro, o fator de forma e o comportamento termodinâmico dos sistemas, bem como estimar propriedades que, em alguns casos, são de difícil acesso experimental. A integração entre os dados simulados e os resultados experimentais contribui decisivamente para o avanço da concepção racional de soluções poliméricas para aplicações multifuncionais [13].

As simulações computacionais, especialmente os métodos de dinâmica molecular, têm sido empregadas com sucesso na previsão do comportamento térmico de polímeros. Os modelos teóricos permitem acompanhar a mobilidade das cadeias, a variação da energia de interação e os rearranjos estruturais frente ao aumento gradual da temperatura. Parâmetros como volume específico, densidade, raio de giro e energia de Coulomb podem ser correlacionados com dados experimentais, validando os modelos propostos. Essa abordagem amplia a precisão da engenharia de materiais, permitindo a projeção de propriedades térmicas antes mesmo da síntese do polímero em laboratório.

Do ponto de vista aplicado, o domínio sobre o comportamento térmico dos polímeros influencia diretamente sua seleção para uso em setores como o

aeroespacial, o automotivo, o biomédico e o eletrônico. Materiais expostos a ciclos térmicos exigem estabilidade em pontos críticos, como T_g (transição vítrea) e T_m (temperatura de fusão), enquanto aplicações que envolvem exposição constante ao calor requerem formulações que resistam ao processo de oxidação e à ruptura das cadeias. A confiabilidade, a durabilidade e a eficiência de componentes poliméricos dependem do equilíbrio entre a estabilidade térmica e as demais propriedades funcionais da formulação [14].

Essas características tornam o estudo do comportamento térmico um eixo central na caracterização e no desenvolvimento de novos materiais poliméricos. A interpretação dos efeitos da temperatura sobre os polímeros é essencial não apenas na fase de concepção do produto, mas também em etapas posteriores, como produção, armazenamento e descarte. A integração entre teoria, simulação e ensaios térmicos experimentais proporciona uma compreensão abrangente, capaz de guiar a formulação de materiais sob medida para demandas específicas da indústria, sempre considerando fatores como eficiência térmica, segurança e sustentabilidade.

O entendimento das respostas estruturais ao aquecimento e ao resfriamento, das variações energéticas e das mudanças conformacionais permite a construção de modelos moleculares mais robustos e preditivos. Nesse contexto, a química computacional emerge como uma ferramenta estratégica para simular propriedades térmicas, prever comportamentos em diferentes condições e extrapolar resultados para sistemas complexos com elevado custo experimental. Dessa forma, o comportamento térmico dos polímeros não se limita a um fenômeno físico observável, mas constitui um conjunto de parâmetros que orienta e valida abordagens computacionais aplicadas ao estudo avançado de materiais macromoleculares.

QUÍMICA COMPUTACIONAL

A Química Computacional é uma área que tem por objetivo utilizar recursos computacionais para aplicar teorias químicas e obter dados sobre sistemas moleculares. Por meio dela, é possível manipular estruturas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre estruturas formadas por átomos e propriedades macroscópicas da matéria [15]. Essa abordagem tem se mostrado cada vez mais relevante, especialmente diante da crescente complexidade dos sistemas estudados e da necessidade de métodos que complementem os dados experimentais.

Com o passar dos anos, houve um avanço significativo na tecnologia, o que possibilitou o acesso a computadores com maior capacidade de processamento. Isso permite a realização de cálculos mais precisos e em menor tempo, com resultados que se aproximam dos obtidos por métodos experimentais [16,17]. Essa evolução contribuiu para a consolidação da Química Computacional como ferramenta essencial na pesquisa científica, ampliando seu uso em diversas áreas como química medicinal, ciência dos materiais e bioquímica.

Um sistema químico pode ser tratado computacionalmente por meio de dois modelos básicos: os métodos clássicos e os métodos quânticos. Os métodos clássicos, como a mecânica molecular, utilizam leis da física clássica para descrever o comportamento das moléculas e são indicados para sistemas maiores, como proteínas e polímeros. Já os métodos quânticos, como a mecânica quântica *ab initio* e a teoria do funcional da densidade (DFT), permitem uma descrição mais detalhada das interações eletrônicas e são aplicados em estudos de reatividade, propriedades eletrônicas e espectroscopia [18].

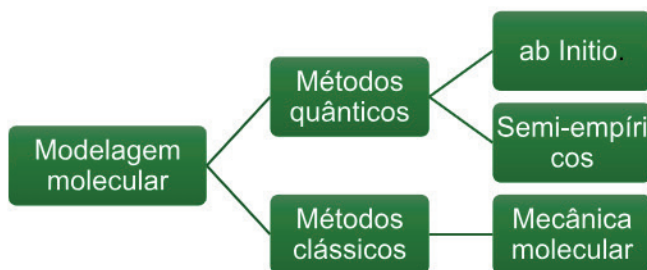


Figura 1 - Principais formas de tratar um sistema de forma computacional

A escolha entre os métodos depende do tipo de sistema e da informação que se deseja obter. Métodos clássicos são mais eficientes em termos de tempo e recursos computacionais, mas não conseguem representar com precisão fenômenos que envolvem transferência de carga ou quebra de ligações químicas. Por outro lado, os métodos quânticos oferecem maior precisão, embora demandem mais tempo de processamento e capacidade computacional. Em muitos casos, é possível combinar os dois modelos por meio de abordagens híbridas, como os métodos QM/MM, que permitem estudar sistemas complexos com equilíbrio entre precisão e eficiência.

A distinção entre os modelos clássicos e quânticos é importante para orientar a escolha metodológica adequada, considerando as limitações e potencialidades de cada abordagem. Essa compreensão permite adaptar os métodos às necessidades específicas de cada estudo, seja na investigação de mecanismos reacionais, na predição de propriedades físico-químicas ou na modelagem de interações intermoleculares.

MÉTODOS AB INITIO

Com o desenvolvimento da mecânica quântica, tornaram-se possíveis abordagens teóricas capazes de descrever sistemas atômicos e moleculares a partir de sua estrutura eletrônica. Esses métodos são denominados *ab initio*, pois se fundamentam em princípios da física quântica e não dependem diretamente de parâmetros empíricos

ajustados para cada sistema específico. De modo geral, essas abordagens buscam determinar propriedades eletrônicas e energéticas por meio da resolução aproximada da equação de Schrödinger.

Para uma partícula, a equação de Schrödinger dependente do tempo pode ser representada pela Eq. 1. Nessa expressão, o operador Hamiltoniano, apresentado na Eq. 2, reúne as contribuições de energia cinética e energia potencial do sistema.

$$\hat{H}\Psi(r;t) = i\hbar \partial\Psi(r;t)/\partial t \quad (\text{Eq. 1})$$

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2m)(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2) + V(r) \quad (\text{Eq. 2})$$

Para sistemas multieletrônicos, entretanto, a solução exata da equação de Schrödinger torna-se inviável em razão do grande número de interações envolvidas e do elevado custo computacional. Por isso, métodos aproximados foram desenvolvidos para viabilizar o tratamento de moléculas e materiais de interesse químico. Ainda assim, o custo computacional dessas abordagens permanece elevado, o que normalmente restringe sua aplicação a sistemas de tamanho moderado.

Entre os principais métodos de estrutura eletrônica, destacam-se a teoria de Hartree-Fock (HF) e a Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês Density Functional Theory). No método Hartree-Fock, adota-se usualmente a aproximação de Born-Oppenheimer, segundo a qual o movimento dos núcleos e dos elétrons pode ser tratado separadamente. A descrição eletrônica é construída a partir de orbitais monoelétrônicos, e a função de onda total do sistema é representada, de forma aproximada, por um determinante de Slater.

$$\hat{f} \psi_i = \epsilon_i \psi_i \quad (\text{Eq. 3})$$

De forma geral, a equação de Hartree-Fock pode ser escrita como na Eq. 3, em que \hat{f} é o operador de Fock, ψ_i representa o orbital molecular do elétron i e ϵ_i corresponde à energia associada a esse orbital. Nessa formulação, cada elétron é tratado como se estivesse submetido a um campo médio gerado pelos demais elétrons. Assim, embora os efeitos de troca sejam considerados, a correlação eletrônica não é descrita de maneira explícita, o que constitui uma das principais limitações do método HF.

Com o objetivo de aumentar a precisão dos resultados, foram desenvolvidos os métodos pós-Hartree-Fock, que incorporam correções à descrição eletrônica obtida em HF. Entre eles, destacam-se o método de Interação de Configurações (*Configuration Interaction*, CI), que considera combinações de determinantes eletrônicos excitados, e o método de perturbação de Møller-Plesset de segunda ordem (MP2), que introduz correções associadas à correlação eletrônica. Em geral, esses métodos fornecem resultados mais precisos, porém com custo computacional ainda mais elevado.

A Teoria do Funcional da Densidade constitui uma das abordagens mais utilizadas na química computacional moderna. Seu formalismo está fundamentado nos teoremas de Hohenberg e Kohn, propostos em 1964, e nas equações de Kohn-Sham, que permitem descrever o estado fundamental de sistemas multieletrônicos em termos da densidade eletrônica $\rho(r)$, em vez da função de onda total. Essa característica torna o DFT particularmente atrativo para o estudo de sistemas maiores, como agregados poliméricos, sólidos, biomateriais, nanoestruturas e moléculas orgânicas e inorgânicas.

No formalismo de Kohn-Sham, a energia total do sistema é expressa como um funcional da densidade eletrônica, conforme a Eq. 4.

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int v_{\text{ext}}(r)\rho(r)dr + EH[\rho] + \text{Exc}[\rho] \quad (\text{Eq. 4})$$

Nessa expressão, $T_s[\rho]$ representa a energia cinética do sistema de elétrons não interagentes; $v_{\text{ext}}(r)$ corresponde ao potencial externo; $EH[\rho]$ é o termo de Hartree, associado à repulsão coulombiana clássica; e $\text{Exc}[\rho]$ é o funcional de troca-correlação, responsável por incorporar os efeitos quânticos não contemplados pelos demais termos. As expressões de $T_s[\rho]$ e $EH[\rho]$ podem ser escritas, respectivamente, como nas Eqs. 5 e 6.

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^N \int \varphi_i^*(r)(-\hbar^2/2m \nabla^2)\varphi_i(r)dr \quad (\text{Eq. 5})$$

$$EH[\rho] = (e^2/2) \iint \rho(r)\rho(r')/|r-r'| dr dr' \quad (\text{Eq. 6})$$

A principal vantagem do DFT reside no fato de que, em muitos casos, ele oferece bom equilíbrio entre custo computacional e qualidade dos resultados, o que explica seu amplo uso em estudos de estrutura eletrônica molecular e de propriedades de

materiais. No entanto, a precisão dessa abordagem depende da escolha adequada do funcional de troca-correlação, e limitações ainda podem ser observadas em sistemas com forte delocalização eletrônica, quebra de simetria de spin ou caráter multiconfiguracional.

Dessa forma, os métodos *ab initio* constituem ferramentas fundamentais para a investigação da estrutura eletrônica da matéria, permitindo a obtenção de informações relevantes sobre propriedades energéticas, geométricas e eletrônicas de sistemas químicos. A escolha entre HF, métodos pós-HF e DFT depende, em geral, do compromisso desejado entre custo computacional e precisão dos resultados.

MÉTODOS SEMIEMPÍRICOS

Os métodos semiempíricos são métodos quânticos baseados, em sua maioria, no formalismo de Hartree-Fock, mas envolvem diversas aproximações e utilizam alguns parâmetros obtidos a partir de dados empíricos. Esses métodos são muito importantes em química computacional para o tratamento de grandes moléculas, nas quais métodos Hartree-Fock completos ou DFT apresentam alto custo computacional, mas o resultado desejado depende da consideração da estrutura eletrônica dos átomos do sistema. O uso de parâmetros empíricos permite a inclusão de efeitos de correlação eletrônica nesses métodos. Dessa forma, cálculos semiempíricos podem apresentar grande correlação com dados experimentais, sendo, em alguns casos, superiores aos resultados obtidos pelo método HF completo [19].

Um dos primeiros métodos semiempíricos desenvolvidos está associado à figura de John Pople, laureado com o Prêmio Nobel de Química de 1998 pelo desenvolvimento de métodos computacionais em química quântica [20]. O método CNDO (do inglês Completed Neglect of Differential Overlap) desconsidera os orbitais de sobreposição. Isso torna o cálculo bem menos custoso do ponto de vista computacional, possibilitando a obtenção de resultados para sistemas maiores em tempo significativamente menor quando comparado ao método HF completo.

Atualmente, estão disponíveis vários métodos semiempíricos, como AM1 [21], PM6 [22], PM7 [23] e RM1 [24], dentre outros, com destaque para o método RM1 (Recife Model 1), desenvolvido por um grupo de pesquisa brasileiro.

Com a aplicação dessas teorias e a criação desses métodos, vários programas de computador foram desenvolvidos, agrupando uma série de funções com a finalidade de obter dados sobre os mais variados sistemas. Programas como ORCA [25] e MOPAC [26] reúnem alguns dos principais métodos semiempíricos que vêm sendo utilizados em diversos trabalhos, variando desde estudos de sistemas de interesse biológico [27] até sistemas poliméricos [28].

MÉTODOS CLÁSSICOS

No método clássico, o sistema é tratado como um conjunto de átomos ligados, sem que seja considerada a estrutura eletrônica desses átomos. Isso é razoável, pois parâmetros associados a um determinado conjunto de átomos permanecem constantes desde que sejam mantidas características como o tipo de espécies envolvidas e a hibridação de cada uma delas.

Dentro do modelo clássico, existe o processo chamado mecânica molecular (MM), em que são utilizados campos de força contendo um conjunto de informações, dentre as quais podem ser citados comprimentos de ligação, ângulos, diedros entre átomos, constantes de força e parâmetros para a representação de interações eletrostáticas. Esses parâmetros são usados em uma sequência de cálculos para a minimização da energia do sistema, a fim de obter estruturas estáveis, além de prever o comportamento energético da interação entre os componentes do sistema.

$$E = E_{\text{ligações}} + E_{\text{angular}} + E_{\text{torçonal}} + E_{\text{não-ligada}} \quad \text{Eq. 5}$$

O termo $E_{\text{ligações}}$ refere-se à energia potencial de ligação, que descreve a interação entre dois átomos ligados por meio de um potencial harmônico [29].

$$E_{\text{ligações}} = \sum_i k_{b,i} (r_i - r_{0,i})^2 \quad \text{Eq. 6}$$

O termo E_{angular} incorpora a energia potencial angular. Esse potencial também é descrito como um potencial harmônico e, portanto, pode ser tratado matematicamente por meio da aplicação da lei de Hooke, na qual se mede a variação do ângulo formado por um conjunto de três átomos consecutivos ligados em relação a um valor de referência. A descrição matemática aplicada pode ser apresentada na Eq. 7 [29].

$$E_{\text{angular}} = \sum_i k_{\theta,i} (\theta_i - \theta_{0,i})^2 \quad \text{Eq. 7}$$

A energia potencial torcional é incorporada pelo termo $E_{\text{torçonal}}$ e representa a rotação da estrutura, normalmente em torno de ligações simples presentes na molécula. Matematicamente, esse termo pode ser expresso como mostrado na Eq. 8 [29].

$$E_{\text{torçional}} = \sum_i \left[\frac{1}{2} V_{1,i} (1 + \cos \phi) + \frac{1}{2} V_{2,i} (1 - \cos 2\phi) \right] + \frac{1}{2} \quad \text{Eq. 8}$$

As interações não ligadas, representadas pelo termo $E_{\text{não-ligada}}$, são incorporadas por meio da soma de dois outros termos: a energia potencial de Lennard-Jones e a energia potencial eletrostática. Combinando esses tipos de interação, podemos escrever matematicamente a Eq. 9 [29].

$$E_{\text{não-ligada}} = \sum_i \sum_{j>i} \left\{ \frac{q_i q_j e^2}{r_{ij}} + 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \right\} \quad \text{Eq. 9}$$

Por meio desse conjunto de equações, é possível determinar a energia potencial total do sistema em estudo. Esse cálculo pode ser usado em algoritmos que promovem a otimização estrutural de um dado sistema ou até mesmo uma análise conformacional.

Para garantir bons resultados com métodos de mecânica molecular, é necessária a escolha do campo de força adequado para tratar o sistema desejado. O campo de força reúne o conjunto de equações e parâmetros necessários à realização dos cálculos de energia do sistema e, a partir desses cálculos, outros algoritmos podem ser aplicados com diversas finalidades. Caso o conjunto de parâmetros não descreva bem o sistema, os resultados obtidos se distanciarão daqueles que seriam observados experimentalmente [30].

Os campos de força podem tratar os átomos de forma individual ou considerar um conjunto de átomos como uma única partícula, a fim de reduzir o tempo computacional necessário para a obtenção dos resultados. A escolha da abordagem a ser utilizada depende de cada sistema e dos dados que se deseja obter [30].

Ao longo do tempo, vários campos de força foram desenvolvidos para as mais diversas aplicações. Dentre eles, podem ser citados UFF, MMFF, CHARMM, AMBER, GROMOS e OPLS, entre outros. Apesar de terem sido desenvolvidos com um propósito inicial específico, a aplicação de um determinado campo de força pode ser expandida para vários outros sistemas. No entanto, é preciso cautela para garantir que o sistema esteja sendo bem representado, e validações devem ser realizadas [30].

O campo de força OPLS-AA vem sendo amplamente utilizado em diversos trabalhos e, dessa forma, testado em muitos sistemas, com uma grande variedade de compostos orgânicos, incluindo alcanos, alcenos, álcoois, éteres, acetais, tióis, sulfetos, dissulfetos, aldeídos, cetonas e amidas [30,31].

Outra aplicação bastante conhecida e amplamente utilizada dos métodos clássicos é a dinâmica molecular (DM) [32]. Nessa técnica, é necessário o conhecimento do potencial de interação intramolecular e intermolecular, e o movimento das partículas ao longo do tempo é descrito por meio das equações clássicas do movimento para cada uma das partículas que compõem o sistema.

Estudos de dinâmica molecular são aplicados a vários tipos de sistemas, com a limitação de não fornecer dados relacionados à natureza eletrônica dos componentes do sistema. Ainda assim, a dinâmica molecular vem sendo aplicada com êxito em diversas áreas, fornecendo resultados capazes de auxiliar, por exemplo, no desenvolvimento de fármacos [33–35][[CIT2]][[CIT3]]. Nesses estudos, avalia-se, dentre outros aspectos, a capacidade de uma determinada substância interagir com sítios ativos de um alvo molecular específico.

Recentemente, a utilização da dinâmica molecular no estudo de compostos poliméricos vem sendo explorada, e bons resultados têm sido obtidos. Na tentativa de obter substitutos biodegradáveis para polímeros, estudos utilizando dinâmica molecular podem ser realizados a fim de comparar propriedades químicas e mecânicas do material [36].

ESTUDO COMPUTACIONAL DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

O estudo computacional de sistemas poliméricos tem se consolidado como uma ferramenta essencial para a análise aprofundada de suas propriedades moleculares e macroscópicas. A aplicação de métodos teóricos e simulações permite prever o comportamento desses materiais em diferentes condições, contribuindo diretamente para o desenvolvimento de estruturas com características específicas, conforme apontado por [36].

As propriedades dos polímeros, como flexibilidade, resistência e estabilidade térmica, resultam de interações complexas entre suas cadeias e grupos funcionais. A modelagem computacional possibilita investigar essas características em nível molecular, oferecendo uma alternativa eficiente aos métodos experimentais, como discutido por [35].

Entre as técnicas mais empregadas, destaca-se a dinâmica molecular, que simula o movimento dos átomos ao longo do tempo. Essa abordagem tem sido aplicada com sucesso em estudos de polímeros biodegradáveis, sistemas voltados para aplicações biomédicas e interações com superfícies metálicas ou cerâmicas. Esses estudos contribuem para o desenvolvimento de adesivos, revestimentos funcionais e materiais compósitos, conforme evidenciado por [34] e [33].

Além da dinâmica molecular, métodos quânticos como a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) são utilizados para investigar propriedades eletrônicas dos polímeros. A DFT permite calcular a distribuição de carga, os orbitais moleculares e a reatividade química, sendo particularmente útil em estudos de materiais condutores e semicondutores, como demonstrado por [25].

Métodos semiempíricos, como PM6, PM7 e RM1, também são empregados quando se busca reduzir o custo computacional sem comprometer a representação da estrutura eletrônica. Esses modelos têm apresentado boa correlação com dados experimentais em estudos envolvendo polímeros orgânicos e híbridos, conforme [24].

Para simulações em larga escala, os métodos clássicos baseados em campos de força são amplamente utilizados. Esses métodos tratam os átomos como esferas interativas e utilizam parâmetros ajustados para representar ligações, ângulos e interações não ligadas. Campos de força como OPLS-AA, CHARMM e AMBER são recorrentes em investigações de polímeros estruturais e funcionais, conforme [30].

A escolha adequada do campo de força é fundamental para garantir a fidelidade dos resultados. Parâmetros mal ajustados podem comprometer a precisão das simulações, distanciando os dados obtidos dos valores experimentais. Por essa razão, é comum realizar validações cruzadas entre simulações e experimentos, como apontado por [31].

Estudos recentes têm explorado abordagens híbridas que combinam métodos clássicos e quânticos, como os modelos QM/MM. Essa estratégia permite tratar regiões específicas do sistema com maior precisão, enquanto o restante é modelado de forma simplificada, otimizando o tempo de cálculo e mantendo a qualidade dos resultados, conforme [33].

Outra tendência emergente é a aplicação de inteligência artificial e aprendizado de máquina para acelerar simulações e prever propriedades de polímeros. Modelos treinados com dados simulados e experimentais têm sido utilizados para identificar padrões e propor novas estruturas com desempenho aprimorado, como maior resistência térmica ou biodegradabilidade, conforme [37].

A modelagem computacional também tem sido empregada na análise da degradação térmica e fotoquímica de polímeros, permitindo prever o comportamento dos materiais ao longo do tempo em diferentes ambientes. Essa abordagem contribui para o desenvolvimento de embalagens, revestimentos e dispositivos com maior durabilidade, como discutido por [35].

Além disso, simulações têm sido utilizadas para investigar a interação de polímeros com substâncias como fármacos, íons e solventes. Esses estudos auxiliam na compreensão de processos de adsorção, difusão e encapsulamento, fundamentais para aplicações em liberação controlada e membranas seletivas, conforme [34].

Em síntese, o estudo computacional de sistemas poliméricos representa uma ferramenta poderosa para a ciência dos materiais. Ao permitir a análise detalhada de estruturas complexas e a predição de propriedades com base em fundamentos teóricos, essa abordagem complementa os métodos experimentais, reduz custos e impulsiona a inovação tecnológica em diversos setores, como destacado por [25].

Além de permitir a simulação do comportamento dinâmico das cadeias poliméricas, a dinâmica molecular possibilita a obtenção de diversos parâmetros físico-químicos fundamentais para a caracterização estrutural e energética dos sistemas. Entre as análises mais relevantes, destaca-se o cálculo da densidade, que fornece informações sobre o grau de compactação do sistema e pode indicar variações conformacionais ou mudanças de fase. O volume simulado, por sua vez, está diretamente relacionado à organização espacial das cadeias e à presença de regiões de empacotamento ou porosidade, sendo útil na avaliação de propriedades como permeabilidade e estabilidade mecânica [38].

A análise da distância quadrática média (RMSD) permite acompanhar a evolução estrutural do sistema ao longo do tempo, indicando o grau de flutuação das cadeias poliméricas em relação a uma conformação de referência. Valores elevados de RMSD podem sugerir instabilidade conformacional, enquanto valores baixos indicam manutenção da estrutura ao longo da simulação. Essa métrica é especialmente útil na comparação entre diferentes condições de simulação, como variações de temperatura ou presença de solventes [39].

As energias de interação também são parâmetros cruciais. A energia de Coulomb revela o impacto das interações eletrostáticas entre os átomos, sendo particularmente relevante em sistemas contendo grupos polares ou íons. Já a energia de van der Waals reflete as forças de dispersão e repulsão entre átomos próximos, influenciando diretamente o empacotamento das cadeias e a formação de agregados. A análise conjunta dessas energias permite avaliar a estabilidade do sistema e identificar regiões de interação preferencial, como sítios de adsorção ou domínios de encapsulamento [40].

Outro recurso importante disponível no GROMACS é o recozimento simulado (simulated annealing), uma técnica que consiste em variar gradualmente a temperatura do sistema ao longo da simulação, promovendo a exploração de diferentes estados conformacionais. Esse procedimento é útil para evitar que o sistema fique preso em mínimos locais de energia, permitindo que ele alcance configurações mais estáveis e representativas do equilíbrio termodinâmico. O recozimento é especialmente eficaz na otimização de estruturas iniciais e na investigação de transições conformacionais em polímeros flexíveis ou semicristalinos [41].

Essas análises, quando integradas, oferecem uma visão abrangente do comportamento dos sistemas poliméricos em nível molecular, permitindo correlacionar propriedades estruturais, energéticas e dinâmicas com o desempenho funcional dos materiais. A capacidade de extrair esses dados com precisão reforça a importância da modelagem computacional como ferramenta complementar aos métodos experimentais, ampliando o entendimento dos mecanismos que regem a estabilidade, a reatividade e a funcionalidade dos polímeros em diferentes contextos [42].

FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS PARA ESTUDO DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

A simulação computacional de sistemas poliméricos exige ferramentas capazes de representar com precisão a complexidade estrutural, conformacional e dinâmica desses materiais. Embora existam pacotes consolidados para biomoléculas e sólidos cristalinos, como GROMACS, LAMMPS e AMBER, observa-se uma escassez de softwares especificamente voltados à modelagem de polímeros, sobretudo em contextos que envolvem elevada massa molar, polidispersidade e arquiteturas ramificadas ou reticuladas. Essa limitação tem sido destacada como um entrave para o avanço da química computacional aplicada à ciência dos polímeros [43].

A representação de polímeros com massas molares próximas às observadas experimentalmente é dificultada pelo custo computacional associado à simulação de sistemas com milhares ou milhões de átomos. Além disso, a parametrização de interações para cadeias longas e flexíveis exige rotinas específicas que nem sempre estão disponíveis em pacotes genéricos. Como alternativa, tem-se explorado o desenvolvimento de ferramentas dedicadas à construção de cadeias poliméricas com controle sobre o grau de polimerização, a arquitetura molecular e a conformação inicial. Essas ferramentas permitem simulações mais próximas das condições reais, ampliando a capacidade de previsão de propriedades estruturais, térmicas e mecânicas [44].

O desenvolvimento de softwares científicos voltados à modelagem de polímeros tem se beneficiado da disponibilidade de linguagens de programação como C++, Fortran e Python, que oferecem flexibilidade, desempenho e ampla compatibilidade com bibliotecas científicas. Códigos como HOOMD-blue, GALAMOST e extensões do LAMMPS têm sido utilizados para simulações coarse-grained e atomísticas de polímeros, permitindo a incorporação de modelos específicos para interações entre monômeros, efeitos de solvente e transições conformacionais.

Além das linguagens, o ambiente de desenvolvimento é favorecido por plataformas como GitHub, GitLab e Bitbucket, que permitem o versionamento de código, colaboração entre pesquisadores e disseminação de ferramentas em código

aberto. O uso de ambientes integrados de desenvolvimento (IDEs) como Visual Studio Code, PyCharm, Eclipse e Spyder tem contribuído para a organização de projetos científicos, integração com bibliotecas externas e depuração eficiente de algoritmos. Essas ferramentas tornam o processo de desenvolvimento mais acessível, mesmo para pesquisadores com formação predominantemente experimental.

Frameworks científicos como NumPy, SciPy, Matplotlib, MDAnalysis, OpenMM e ASE (Atomic Simulation Environment) oferecem suporte para operações matemáticas, análise de trajetórias, visualização de estruturas e controle termodinâmico. A integração entre esses frameworks e os motores de simulação permite a construção de pipelines completos para geração, simulação e análise de sistemas poliméricos. Essa modularidade tem sido apontada como um fator decisivo para a personalização de ferramentas e para a adaptação de modelos às necessidades específicas de cada estudo [45].

A construção de interfaces gráficas para softwares científicos tem sido viabilizada por frameworks como Qt, que oferece recursos avançados para o desenvolvimento de aplicações multiplataforma com visualização interativa, controle de parâmetros e integração com bibliotecas de simulação. O Qt é amplamente utilizado em projetos científicos por sua estabilidade, documentação extensa e compatibilidade com linguagens como C++ e Python (via PyQt ou Qt for Python). Sua aplicação em ferramentas voltadas à modelagem molecular permite a criação de ambientes intuitivos para geração de estruturas, execução de simulações e análise de resultados, contribuindo para a disseminação e usabilidade de soluções computacionais na área de polímeros.

A modelagem de sistemas poliméricos em escala molecular representa uma estratégia fundamental para compreender os mecanismos que determinam suas propriedades físico-químicas, estruturais e dinâmicas. A construção de modelos que reproduzam com fidelidade a massa molar, a arquitetura e a conformação das cadeias permitem investigar fenômenos como solubilidade, viscosidade, transições conformacionais e formação de estruturas supramoleculares. A articulação entre fundamentos teóricos e simulações computacionais tem ampliado a capacidade de prever o comportamento desses sistemas em diferentes regimes de concentração e condições ambientais, contribuindo para o desenvolvimento de materiais com funcionalidades específicas e para o entendimento de processos aplicados à indústria, à biotecnologia e à engenharia de superfícies.

REFERÊNCIAS

- [1] M.F. Maitz, Applications of synthetic polymers in clinical medicine, *Biosurf. Biotribol.* 1 (2015) 161–176. <https://doi.org/10.1016/j.bsbt.2015.08.002>.
- [2] S. Salifu, D. Desai, O. Ogunbiyi, K. Mwale, Recent development in the additive manufacturing of polymer-based composites for automotive structures—a review, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 119 (2022) 6877–6891. <https://doi.org/10.1007/s00170-021-08569-z>.
- [3] S. Park, C.W. Lee, J.M. Kim, Highly conductive PEDOT:PSS patterns based on photo-crosslinkable and water-soluble diacetylene diol additives, *Org. Electron.* 58 (2018) 1–5. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2018.03.044>.
- [4] M. Zhang, G.M. Biesold, W. Choi, J. Yu, Y. Deng, C. Silvestre, Z. Lin, Recent advances in polymers and polymer composites for food packaging, *Materials Today* 53 (2022) 134–161. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2022.01.022>.
- [5] M. Nodehi, Epoxy, polyester and vinyl ester based polymer concrete: a review, *Innovative Infrastructure Solutions* 7 (2022). <https://doi.org/10.1007/s41062-021-00661-3>.
- [6] M.-P. Santoni, New Insights into Hybrid Materials Based on Conductive Polymers and Their Use in Energy-Related Applications, *Materials* 15 (2022) 4928. <https://doi.org/10.3390/ma15144928>.
- [7] Z. Mansoor, F. Tchenbou-Magaia, M. Kowalczyk, G. Adamus, G. Manning, M. Parati, I. Radecka, H. Khan, Polymers Use as Mulch Films in Agriculture—A Review of History, Problems and Current Trends, *Polymers (Basel)*. 14 (2022) 5062. <https://doi.org/10.3390/polym14235062>.
- [8] A.H. Mazurek, Ł. Szeleszczuk, T. Simonson, D.M. Pisklak, Application of various molecular modelling methods in the study of estrogens and xenoestrogens, *Int. J. Mol. Sci.* 21 (2020) 1–31. <https://doi.org/10.3390/ijms21176411>.
- [9] G.R. Villas-Boas, V.C. Rescia, M.M. Paes, S.N. Lavorato, M.F. de Magalhães-Filho, M.S. Cunha, R. da C. Simões, R.B. de Lacerda, R.S. de Freitas-Júnior, B.H. Bruno, A.M. Mapeli, M. da S.T. Henriques, W.R. de Freitas, L.A.F. Lopes, L.G.R. Oliveira, J.G. da Silva, S.E. Silva-Filho, A.P.S. da Silveira, K. V. Leão, M.M. Maria, J.S. Fernandes, R.K.N. Cuman, F.M. Francielli, J.F. Comar, L. do A. Brasileiro, J.N. dos Santos, S.A. Oesterreich, The New Coronavirus (SARS-CoV-2): A Comprehensive Review on Immunity and the Application of Bioinformatics and Molecular Modeling to the Discovery of Potential Anti-SARS-CoV-2 Agents, *Molecules* 25 (2020). <https://doi.org/10.3390/molecules25184086>.

- [10] Y. Cui, P. Zhu, X. Liao, Y. Chen, Recent advances of computational chemistry in organic solar cell research, *J. Mater. Chem. C Mater.* 8 (2020) 15920–15939. <https://doi.org/10.1039/D0TC03709E>.
- [11] A.W. Prentice, M.A. Zwiijnenburg, The Role of Computational Chemistry in Discovering and Understanding Organic Photocatalysts for Renewable Fuel Synthesis, *Adv. Energy Mater.* 11 (2021). <https://doi.org/10.1002/aenm.202100709>.
- [12] A. Rovaletti, L. De Gioia, P. Fantucci, C. Greco, J. Vertemara, G. Zampella, F. Arrigoni, L. Bertini, Recent Theoretical Insights into the Oxidative Degradation of Biopolymers and Plastics by Metalloenzymes, *Int. J. Mol. Sci.* 24 (2023) 6368. <https://doi.org/10.3390/ijms24076368>.
- [13] S. Zeng, D. Lu, R. Yang, Effects of Crystallinity and Branched Chain on Thermal Degradation of Polyethylene: A SCC-DFTB Molecular Dynamics Study, *Polymers (Basel)*. 16 (2024). <https://doi.org/10.3390/polym16213038>.
- [14] H. Wang, Z. Li, M. Xu, Thermoresponsive Polymers with LCST Behavior for Biomedical Applications, *Polymers (Basel)*. 15 (2023) 112. <https://doi.org/10.3390/polym15010112>.
- [15] S. McArdle, S. Endo, A. Aspuru-Guzik, S.C. Benjamin, X. Yuan, Quantum computational chemistry, *Rev. Mod. Phys.* 92(2020)015003. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.015003>.
- [16] Z. Wu, D. Yuan, P. Treeratpituk, C.L. Giles, Science and Ethnicity: How Ethnicities Shape the Evolution of Computer Science Research Community, (2014). <http://arxiv.org/abs/1411.1129> (accessed March 13, 2022).
- [17] G.B. Goh, N.O. Hodas, A. Vishnu, Deep learning for computational chemistry, *J. Comput. Chem.* 38 (2017) 1291–1307. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/jcc.24764>.
- [18] R.A. Friesner, Ab initio quantum chemistry: Methodology and applications, 2005. www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.0408036102.
- [19] J.A. Pople, Nobel Lecture: Quantum chemical models*, 1998.
- [20] L. Radom, John A. Pople (1925–2004), *Nature* 428 (2004) 816. <https://doi.org/10.1038/428816a>.
- [21] M. J. S. Dewar, E. G. Zoebisch, E. F. Healy, J. J. P. Stewart, Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model, *J. Am. Chem. Soc.* 107 (2002) 3902–3909. <https://doi.org/10.1021/ja00299a024>.

- [22] J.J.P. Stewart, Optimization of parameters for semiempirical methods V: Modification of NDDO approximations and application to 70 elements, *J. Mol. Model.* 13 (2007) 1173–1213. <https://doi.org/10.1007/s00894-007-0233-4>.
- [23] J.J.P. Stewart, Optimization of parameters for semiempirical methods VI: More modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters, *J. Mol. Model.* 19 (2013) 1–32. <https://doi.org/10.1007/s00894-012-1667-x>.
- [24] G.B. Rocha, R.O. Freire, A.M. Simas, J.J.P. Stewart, RM1: A reparameterization of AM1 for H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br, and I, *J. Comput. Chem.* 27 (2006) 1101–1111. <https://doi.org/10.1002/jcc.20425>.
- [25] F. Neese, F. Wennmohs, U. Becker, C. Riplinger, The ORCA quantum chemistry program package, *Journal of Chemical Physics* 152 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0004608>.
- [26] James J. P. Stewart, MOPAC2016, (2016) [HTTP://OpenMOPAC.net](http://OpenMOPAC.net).
- [27] P.de S.M. Pinheiro, D.A. Rodrigues, C.M.R. Sant'Anna, C.A.M. Fraga, Modeling zinc oxygen coordination in histone deacetylase: A comparison of semiempirical methods performance, *Int. J. Quantum Chem.* 118 (2018) e25720-n/a. <https://doi.org/10.1002/qua.25720>.
- [28] R.M. Swanepoel, C.E. Schwarz, A Semiempirical Method for the Estimation of High-Pressure (Solvent + Polymer) Phase Boundaries in the Solution Polymerization Process, *Ind. Eng. Chem. Res.* 60 (2021) 697–718. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c04108>.
- [29] Y. Lv, C. Ruan, Molecular dynamics simulation of nonisothermal crystallization of a single polyethylene chain and short polyethylene chains based on OPLS force field, *E-Polymers* 22 (2022) 136–146. <https://doi.org/10.1515/epoly-2022-0019>.
- [30] W.L. Jorgensen, D.S. Maxwell, J. Tirado-Rives, Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids, 1996. <https://pubs.acs.org/sharingguidelines>.
- [31] C.E.S. Bernardes, A. Joseph, Evaluation of the OPLS-AA Force Field for the Study of Structural and Energetic Aspects of Molecular Organic Crystals, (2015). <https://doi.org/10.1021/jp512349r>.
- [32] B.J. Alder, T.E. Wainwright, Studies in molecular dynamics. I. General method, *J. Chem. Phys.* 31 (1959) 459–466. <https://doi.org/10.1063/1.1730376>.

- [33] K.C. Sivakumar, J. Haixiao, C.B. Naman, T.P. Sajeevan, Prospects of multitarget drug designing strategies by linking molecular docking and molecular dynamics to explore the protein ligand recognition process, *Drug Dev. Res.* 81 (2020) 685–699. <https://doi.org/10.1002/ddr.21673>.
- [34] O.M.H. Salo-Ahen, I. Alanko, R. Bhadane, A.M.J.J. Bonvin, R. Vargas Honorato, S. Hossain, A.H. Juffer, A. Kabedev, M. Lahtela-Kakkonen, A.S. Larsen, E. Lescrinier, P. Marimuthu, M.U. Mirza, G. Mustafa, A. Nunes-Alves, T. Pansar, A. Saadabadi, K. Singaravelu, M. Vanmeert, processes Molecular Dynamics Simulations in Drug Discovery and Pharmaceutical Development, (2020). <https://doi.org/10.3390/pr9010071>.
- [35] H. Dana, G. Mahmoodi Chalbatani, E. Gharagouzloo, S.R. Miri, F. Memari, R. Rasoolzadeh, M.R. Zinatizadeh, P. Kheirandish Zarandi, V. Marmari, In silico Analysis, Molecular Docking, Molecular Dynamic, Cloning, Expression and Purification of Chimeric Protein in Colorectal Cancer Treatment, *Drug Des. Devel. Ther.* 14 (2020) 309–329. <https://doi.org/10.2147/DDDT.S231958>.
- [36] M. Sangkhawasi, T. Remsungnen, A.S. Vangnai, R.P. Poo-arporn, T. Rungrotmongkol, All-Atom Molecular Dynamics Simulations on a Single Chain of PET and PEV Polymers, *Polymers (Basel)*. 14 (2022) 1161. <https://doi.org/10.3390/polym14061161>.
- [37] S. Cassola, M. Duhovic, T. Schmidt, D. May, Machine learning for polymer composites process simulation – a review, *Compos. B Eng.* 246 (2022) 110208. <https://doi.org/10.1016/J.COMPOSITESB.2022.110208>.
- [38] M. Mazo, N. Balabaev, A. Alentiev, I. Strelnikov, Y. Yampolskii, Structure and properties of high and low free volume polymers studied by molecular dynamics simulation, *Computation* 7 (2019). <https://doi.org/10.3390/computation7020027>.
- [39] G.A. Tribello, M. Bonomi, D. Branduardi, C. Camilloni, G. Bussi, PLUMED 2: New feathers for an old bird, *Comput. Phys. Commun.* 185 (2014) 604–613. <https://doi.org/10.1016/J.CPC.2013.09.018>.
- [40] I.H. Sahputra, A. Echtermeyer, The effects of the van der Waals potential energy on the Young's modulus of a polymer: comparison between molecular dynamics simulation and experiment, *Journal of Polymer Research* 28 (2021). <https://doi.org/10.1007/s10965-021-02413-4>.
- [41] M. Abraham, A. Alekseenko, B. Andrews, V. Basov, P. Bauer, H. Bird, E. Briand, A. Brown, M. Doijade, G. Fiorin, S. Fleischmann, S. Gorelov, G. Gouillardet, A. Gray, M.E. Irrgang, F. Jalalypour, P. Johansson, C. Kutzner, G. Łazarski, J.A. Lemkul, M. Lundborg, P. Merz, V. Miletić, D. Morozov, L. Müllender, J. Nabet, S. Páll, A. Pasquandibisceglie, M. Pellegrino, N. Piasentin, D. Rapetti, M.U. Sadiq, H. Santuz, R. Schulz, M. Shirts, T. Shugueva, A. Shvetsov, P. Turner, A. Villa, S. Wingbermühle, B. Hess, E. Lindahl, GROMACS 2025.3 Manual, (2025). <https://doi.org/10.5281/zenodo.16992569>.

[42] K. Li, J. Yan, Y. Zhou, B. Li, X. Li, β -cyclodextrin and magnetic graphene oxide modified porous composite hydrogel as a superabsorbent for adsorption cationic dyes: Adsorption performance, adsorption mechanism and hydrogel column process investigates, *J. Mol. Liq.* 335 (2021) 116291. <https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2021.116291>.

[43] N.S. and S.R. Puri Sachin and Patil, Current Research Overview of Modelling and Simulation of Polymer Composites, in: S. and D.P. and G.J.A. Parameswaranpillai Jyotishkumar and Ganguly (Ed.), *Fiber and Ceramic Filler-Based Polymer Composites for Biomedical Engineering*, Springer Nature Singapore, Singapore, 2024: pp. 451–465. https://doi.org/10.1007/978-981-97-3909-7_21.

[44] T. Bernhard, F. Schwarz, A.A. Gusev, *pylimer-tools: A Python Package for Generating and Analyzing Bead-Spring Polymer Networks*, (2025). <http://arxiv.org/abs/2508.11509>.

[45] C. Fernandes, *Scientific Machine Learning for Polymeric Materials*, *Polymers (Basel)*. 17 (2025). <https://doi.org/10.3390/polym17162222>.