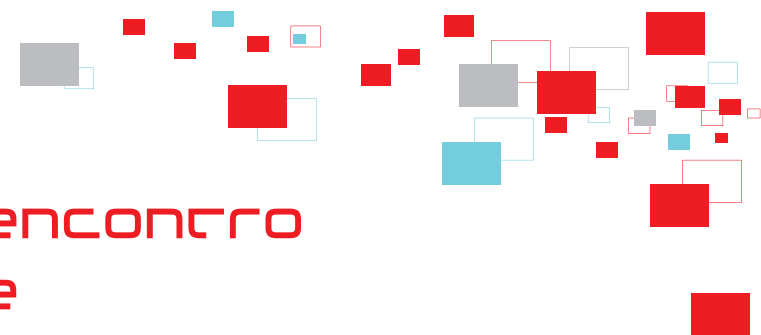


II encontro
de
jovens
investigadores



**II Encontro de Jovens Investigadores
do Instituto Politécnico de Bragança**
Livro de resumos

Influência das propriedades reológicas do sangue em microcanal com contração simétrica

Silva¹, Susana; Caetano², Solange; Veiga³, Carla; Calejo⁴, Joana

¹ susanaftsilva@gmail.com, ESTiG, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal.

² solangemendes90@gmail.com, ESTiG, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal.

³ cveiga@ipb.pt, ESTiG, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal.

⁴ jo_calejo6@hotmail.com, ESTiG, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal.

Resumo

Nas últimas décadas o interesse nos estudos da aterosclerose tem assumido um lugar de destaque na área da medicina pois, devido ao estilo de vida adotado pela sociedade moderna, esta patologia do sistema cardiovascular tornou-se numa das maiores causas de morte. Os estudos de escoamentos sanguíneos in vivo, e mesmo in vitro, levantam por vezes problemas por questões éticas, pelo que ferramentas numéricas têm vindo a ganhar espaço na área da hemodinâmica. Neste trabalho recorreu-se à dinâmica de fluidos computacional para simular escoamentos newtonianos e não-newtonianos em microcanais com estenose simétrica. Para tal foram realizadas simulações em canais de secção retangular com graus de estenose distintos, o que permitiu estudar a influência do grau de contração nas propriedades do escoamento sanguíneo. Para descrever o comportamento não-newtoniano do sangue utilizou-se o modelo de Carreau, sendo os resultados obtidos considerando este modelo comparados com os obtidos para fluido newtoniano, o que permitiu avaliar o impacto das propriedades não-newtonianas nos escoamentos estudados. Com este estudo, verificou-se que a existência de ateroma no microcanal altera os perfis típicos de queda de pressão e velocidade, verificando-se um aumento da queda de pressão e velocidade máxima com aumento do grau de estenose. No que diz respeito à influência das propriedades não-newtonianas do sangue, constatou-se que estas não têm grande impacto nos perfis de velocidade, não se verificando o mesmo no que diz respeito às quedas de pressão pois estas assumem valores mais elevados quando se admitiu o modelo de Carreau para descrever a reologia do sangue.

Palavras-chave: Sangue; Ateroma; Dinâmica de Fluidos Computacional; Microcanais

The cation specific effects on the aqueous solubility of amino acids: experimental and molecular dynamics simulations contributions

Sousa¹, Sofia; Ferreira², Olga; ³Tomé, Luciana; Pinho⁴, Simão P.

¹ a22519@alunos.ipb.pt, ESTiG, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal

² oferreira@ipb.pt, Laboratório Associado LSRE/LCM, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal

³ l_tome@portugalmail.pt, Universidade de Aveiro, Portugal

⁴ Laboratório Associado LSRE/LCM, Instituto Politécnico de Bragança, Portugal

Resumo

The study of ion specific effects on the aqueous solubility of amino acids and proteins is crucial for the development of many areas of biochemistry and biotechnology. In this work, the effect of ions of inorganic salts on the aqueous solubility of amino acids was studied by performing experimental solubility measurements and molecular dynamics simulations. Three amino acids (DL-alanine, L-isoleucine and L-valine) were chosen as model compounds. Taking into consideration their biological relevance and scarce available information, cations such as K⁺, Li⁺, Ca²⁺ and Al³⁺ were selected, varying the anion between Cl⁻ or SO₄²⁻. New solubility data were measured, at 298.15 K, using the analytical isothermal shake-flask method, for DL-alanine (Ala) in aqueous solutions of CaCl₂ and K₂SO₄, and for L-isoleucine (Ile) and L-valine (Val) in aqueous solutions of CaCl₂, K₂SO₄, LiCl, Li₂SO₄, Al₂(SO₄)₃ and AlCl₃. For LiCl no significant solubility effect was observed for Val and Ile while Li₂SO₄ and K₂SO₄ induced a salting-out effect. In the case of CaCl₂, Al₂(SO₄)₃ and AlCl₃, a pronounced salting-in was observed, much stronger for the aluminum salts. The molecular dynamics simulations results obtained suggest that the solubility effects of salting-in inducing cations is different from that of the anions. Strongly hydrated polyvalent cations (Ca²⁺ and Al³⁺) present extremely strong interactions with the carboxylic group of the amino acids, resulting in a pronounced salting-in effect. On the other hand, Li⁺ and K⁺ ions do not establish important interactions with the amino acids, having thus a small effect on their aqueous solubility.

Palavras-chave: Amino acids; Solubility; Ion effects; Molecular dynamics